



MARGOT PAULINO ZUNINI

Dr

[margot@fq.edu.uy](mailto:margot@fq.edu.uy)

Avda General Flores 2124 1  
1800-Montevideo Uruguay  
+59829291558

SNI

Ciencias Naturales y Exactas  
/ Ciencias Químicas  
Categorización actual: Nivel  
II (Activo)

Fecha de publicación: 18/09/2018  
Última actualización SNI: 18/09/2018

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química - UDeLaR/ Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Sector Educación Superior/Público  
Dirección: Centro de Bioinformática Estructural - Departamento de Teoría y Estructura de la Materia y Afines / 11600 / Montevideo , Montevideo , Uruguay  
Teléfono: (02) 9291558  
Correo electrónico/Sitio Web: [margot@fq.edu.uy](mailto:margot@fq.edu.uy)

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

##### DOCTORADO

###### Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1987 - 1993)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay  
Título de la disertación/tesis: Relación estructura-actividad en compuestos nitro heterocíclicos con actividad tripanocida sobre Trypanosoma cruzi y otros tripanosomatdeos sensibles  
Tutor/es: Andres Oscar Manuel Stoppani  
Obtención del título: 1993  
Palabras Clave: t cruzi, bioinformatica farmacoquimica  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

##### GRADO

###### Química Farmacéutica (1976 - 1982)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay  
Título de la disertación/tesis:  
Obtención del título: 1982  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

### Formación complementaria

#### CONCLUIDA

##### POSDOCTORADOS

###### Estadías postdoctorales en el Trinity College Dublin (2005 - 2006)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Trinity College Dublin , Irlanda  
Palabras Clave: Chagas, nuevos fármacos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / diseño de fármacos

###### Pasantías Postdoctorales en el Center for Biophysical Sciences and Engineering (2003 - 2004)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / University of Alabama at Birmingham , Estados Unidos

Palabras Clave: trypanothione reductase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Enfermedad de Chagas, Química Médica

**Pasantía posdoctoral en la Laurentian University, Laboratory of Theoretical Chemistry, Sudbury, Ontario (2001 - 2001)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Laurentian University , Canadá

Palabras Clave: dinámica molecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Bioinformática Estructural, Biomoléculas

**Pasantía posdoctoral.Physicochemical Department. Uppsala University (1966 - 1999)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Univerisdad de Uppsala , Suecia

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Estadía posdoctoral en el Departamento de Química UFSCar (1999 - 1999)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Sao Carlos , Brasil

Palabras Clave: dinámica molecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Bioinformática Estructural, Biomoléculas

**Estadía posdoctoral en la Estación experimental del Zaidín e Instituto Lopez-Neira (1999 - 1999)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Parasitología y Biomedicina "López - Neyra", España

Palabras Clave: bioinformática estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Bioinformática Estructural, Biomoléculas

**Estadías posdoctorales de un mes en el IPP (1996 - 1996)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institut Pasteur Paris , Francia

Palabras Clave: Chagas, nuevos fármacos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / microcalorimetría

**Pasantías posdoctorales.Physicochemical Department. Uppsala University (1995 - 1995)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Univerisdad de Uppsala , Suecia

Palabras Clave: bioinformática estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Bioinformática Estructural, Biomoléculas

**Pasantía posdoctoral en el Institut de Genetique et Microbiologie de la Universidad Paris Dus Francia (1994 - 1994)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Université Paris Sud (XI) , Francia

Palabras Clave: Aspergillus nidulans DNA-CreA interactions

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**ETH,ZURICH (1994 - 1994)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Swiss Federal Institute of Technology in Zurich /

Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) Zürich , Suiza

Palabras Clave: structural bioinformatics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

**Working Party on Computational Chemistry (1994 - 1994)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Université de Nancy 2 , Francia

Palabras Clave: computational chemistry

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

**Pasantía postdoctoral.Physicochemical Department. Uppsala University (1994 - 1994)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Univerisdad de Uppsala , Suecia

Palabras Clave: bioinformática estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

## Idiomas

### Inglés

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

### Francés

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

### Español

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

### Italiano

Entiende bien / Habla regular / Lee bien / Escribe regular

## Areas de actuación

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas /Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos

## Actuación profesional

### SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Química - UDeLaR

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### Funcionario/Empleado (08/2014 - a la fecha)

Profesor Titular ,40 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 5

Cargo: Efectivo

#### Funcionario/Empleado (08/2009 - 05/2014)

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti ,32 horas semanales / Dedicación total  
Es uno de los tres vínculos mas relevantes de mi actuación profesional.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (08/2004 - 08/2009)**

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti ,32 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (08/1999 - 08/2004)**

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti ,32 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (11/1996 - 11/2001)**

Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv ,36 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (08/1997 - 08/1999)**

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti ,32 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (11/1991 - 11/1996)**

Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv ,36 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 4

Cargo: Efectivo

**Funcionario/Empleado (11/1989 - 11/1991)**

Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv ,36 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (02/1988 - 12/1989)**

Profesor Adjunto ,40 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Efectivo

**Funcionario/Empleado (01/1988 - 12/1988)**

Profesor Adjunto de Química Cuántica ,36 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (01/1987 - 12/1987)**

Profesor Adjunto de Química Cuántica ,24 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (01/1986 - 12/1986)**

Prof. Adjunto de Química Cuántica ,24 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (01/1985 - 12/1985)**

Prof. Adjunto Provisional de Química Cuántica ,24 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (01/1983 - 12/1984)**

Asistente ,24 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Interino

**Colaborador (04/1983 - 12/1983)**

Asistente Honorario ,20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Honorario

**Funcionario/Empleado (04/1979 - 12/1982)**

Ayudante ,15 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (04/1978 - 12/1979)**

Ayudante de Físicoquímica ,15 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Colaborador (08/1977 - 08/1978)**

Ayudante Honorario ,20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (08/1977 - 12/1977)**

Ayudante ,8 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Colaborador (06/1976 - 06/1977)**

Ayudante Honorario ,20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**ACTIVIDADES**

**LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN**

**CHAGASMEDCHEM-Diseño de Candidatos a ser desarrollados como Antichagásicos. (11/1993 - a la fecha)**

CHAGASMEDCHEM. Diseño de moléculas candidatas a ser empleadas como quimioterápicos de la Enfermedad de Chagas, en base al estudio de mecanismos enzimáticos de defensa contra el stress oxidativo de parásitos y huéspedes. Desarrollo de formas farmacéuticas (nanoestructuras) conteniendo extractos de productos naturales con actividades antitripanosoma. Estudios de la expresión en T cruzi de ciclofilina y su relación con inhibidores análogos de ciclosporina. Modelado tridimensional y validación de la estructura de: proteína nucleosomal del cromosoma de Trypanosoma cruzi, transialidasa y dehidrogenasa de alfa-aminoácidos hidroxiaácido aromáticos (AHADH)

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA/LaBioFarMol, Coordinador o Responsable  
Equipo: M. DUBIN, E. ALVAREDA, S. AGUILERA-MORALES, F. IRIBARNE, DENIS P, R. CARRARO, BUA J, O. TAPIA, H. CERECETTO, H. PARDO, R. TAPIA, K. VAZQUEZ, M. GONZÁLES, C.O. SALAS

Palabras clave: bioinformática estructural Chagas, nuevos fármacos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

#### **NUTRICAROT (10/2012 - a la fecha)**

CAROT. Estrategias in silico, in vitro y empresariales aplicada a la modelización, análisis conformacional, isomería estructural de carotenoides y su implicancia en las interacciones y propiedades in vivo y al desarrollo de un nutraceutico en base a carotenoides

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural, Coordinador o Responsable

Equipo: A. GAMBARO, A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ, M. VEGA, R. RODRIGUEZ, C. LOPEZ, M.J. RODRIGO, V. VELAZQUEZ, C. STINCO

#### **PROVITIS. Estudios experimentales e in silico de las propiedades antioxidantes de fenoles contenidos en productos naturales (03/2003 - a la fecha)**

PROVITIS. El objetivo principal de esta línea de investigación es el estudio y obtención a escala piloto, de un concentrado patronizado de polifenoles a partir de propóleos y uvas, cuyo contenido fenólico y capacidad antioxidante estarán documentados y certificados. Se están realizando los análisis de polifenoles totales en muestras vino tinto y propóleos, de capacidad antioxidante mediante técnicas de DPPH y ABTS+, obtención de un concentrado de vino tinto patronizado (contenido fijo de polifenoles totales), de un extracto hidro etanólico de propóleos por método de extracción a reflujo (Soxhlet), mezcla de concentrados y extractos y monitoreo del contenido final de polifenoles y capacidad antioxidante de los concentrados obtenidos. En paralelo a los estudios de laboratorio húmedo, se realizan medidas de docking y dinámica molecular en modelos contruidos a partir de datos cristalográficos de las enzimas ciclooxigenasa II y xantina oxidasa, asociadas a los mecanismos de inflamación y gota, respectivamente. Se estudian los modos y energías de interacción de los fenoles contenidos en los extractos obtenidos con estas dos enzimas, con el fin de brindarle a los extractos un valor agregado adicional, que indique probables acciones antiinflamatorias y antigotosas. Esta es una línea multidisciplinaria que integra además el desarrollo de productos liposomados, en coordinación con el Nanomat del Polo Tecnológico de Pando, y del análisis de sus propiedades sensoriales, en coordinación con el Laboratorio de Análisis sensorial del Departamento de Alimentos de la Facultad de Química.

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA / LabioFarMol, Coordinador o Responsable

Equipo: P. MIRANDA, M. DUBIN, S. AGUILERA-MORALES, CARMONA. P., RODRIGUEZ A, L. CALDERÓN, M. PEARCE, A. ROASCIO, E. ALVAREDA, C. ROJAS, A. GAMBARO, H. PARDO, G. MOYNA

Palabras clave: propóleos antioxidantes fenoles uvas liposomas ciclooxigenasa, xantina oxidasa

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

#### **ABRESIST. Bioinformática estructural aplicada al estudio del mecanismo de resistencia de antibióticos quinolónicos (11/2004 - a la fecha)**

Estudio de las bases moleculares de la resistencia de antibióticos quinolónicos, mediante el diseño de proteínas transmembranales de Neisseria gonorrhoeae y la elucidación de factores determinantes de la unión y reflujo hacia el exterior de las bacterias, de dichas moléculas.

2 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA/Centro de Bioinformática Estructural, Coordinador o Responsable

Equipo: ACEVEDO A, BORTHAGARAY G

Palabras clave: bioinformática estructural resistencia a antibióticos quinolónicos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

**FABLOCK. Estudios in silico de proteínas transportadoras de ácidos grasos de Echinococcus granulosus (06/2009 - a la fecha)**

Las estrategias de simulación in silico: modelado biomolecular, anclaje, dinámica molecular son aplicadas para dilucidar la estructura tridimensional y comportamiento en solución de proteínas transportadoras de ácidos grasos descubiertas a partir del genoma del Echinococcus granulosus. A partir de estas investigaciones, se puede predecir la estructura tridimensional de proteínas hasta ahora desconocida, proponer sus modos y especificidad de unión a ligandos ácidos grasos y estudiar otras posibles funcionalidades como el disparo de señales de localización nuclear.

4 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: A. ESTÉVES

Palabras clave: FABPs

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

**CREA. Estudio de la interacción con ADN de factores transcripcionales de Aspergillus Nidulans (03/2010 - a la fecha)**

Estrategias in silico para el modelado biomolecular del factor transcripcional CreA y su unión a ADN. A partir del modelo tridimensional de CreA y un conjunto de mutantes, unidos a ADN, se realizan simulaciones de dinámica molecular en fase acuosa. El análisis del comportamiento simulado de los complejos en solución permite inferir patrones de contacto proteína-ADN y medir energías de interacción. Tales medidas se pueden correlacionar con medidas experimentales de unión proteína-ligando realizadas por investigadores que pertenecen a nuestro equipo de trabajo

5 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: P. ESPERÓN, C. SCAZZOCCHIO

Palabras clave: CreA ADN

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

**NEURONACH. Bioinformática Estructural aplicada al estudio de interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de receptores nicotínicos de acetil colina (03/2004 - a la fecha)**

Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes desordenes neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, como por ejemplo el diseño de nuevos fármacos antiparkinsonianos, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epiatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de los diferentes ligandos y así, a través de un tamizaje virtual, proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

10 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: F. DAJAS, F. IRIBARNE, G. SILVA, J.A. ABIN, B.K. CASSELS, S. WONNACOTT, Y GONZÁLES, P. PEZZATI, CH CHIPOT, F. DEHEZ, T. GALAGHER

Palabras clave: nAChR nicotina enfermedades neurodegenerativas citisina anatoxina farmacóforo, QSAR, docking, MD, FEP

Áreas de conocimiento:

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

### **CHAGASMEDCHIM.QUINO- Paranaftoquinonas contra el Mal de Chagas (03/2013 - a la fecha)**

Este proyecto es el más reciente emprendimiento de investigación que continúa la búsqueda de nuevos candidatos para ser desarrollados contra el Mal de Chagas. Su objetivo general es el diseño de nuevos candidatos para el desarrollo de medicamentos contra el Mal de Chagas. Sus objetivos específicos incluyen síntesis de series de paranaftoquinonas, tamizaje virtual, estudios parasitológicos, bioquímicos, cristalográficos y propuestas de nuevos candidatos a ser desarrollados como medicamentos para el Mal de Chagas.

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Investigación

Coordinador o Responsable

Cancelado

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

Universidad de la República, Uruguay, Cooperación

Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile, Cooperación

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: H. CERECETTO, R. TAPIA, C.O. SALAS, M GONZALEZ, VAZQUEZ, L KRAUTH-SIEGEL

Palabras clave: quinonas chagas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Físicoquímica

### **FABPLOCK: estudio de proteínas transportadoras de ácidos grasos en cestodes (03/2009 - a la fecha)**

El Proyecto, incluido en la línea de investigación del mismo nombre, tiene como objetivo general la profundización en el conocimiento de la función de las FABPs de *Echinococcus granulosus* e identificación de blancos potenciales para diagnóstico, desarrollo de drogas y vacunas. Como objetivos específicos: Rastreo de antagonistas de las EgFABPs mediante técnicas *in silico*, *in vitro* y posterior comprobación *in vivo*.

3 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Equipo: A. ESTÉVES

Palabras clave: dinámica molecular cestodes FABPs docking *Echinococcus granulosus* ácidos grasos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

### **CreA: Estudios de interacciones ADN-proteína aplicados a proteínas de *Aspergillus nidulans* (03/2010 - a la fecha)**

Este proyecto se inscribe en la línea DNA-PROT cuyo objetivo general consiste en estudiar la interacción de la proteína CreA, del hongo *Aspergillus nidulans* con ADN. Como objetivos específicos tiene principalmente dos: uno es el estudio por métodos experimentales de laboratorio húmedo la interacción de CreA y un conjunto de mutantes, con un oligonucleótido de 10 pares de bases. El segundo objetivo consiste en modelizar la estructura tridimensional de CreA y todos los mutantes a partir de el mismo modelo y realizar simulaciones de dinámica molecular de largo alcance de tales proteínas unidas a un modelo de oligómero. Finalmente, a través del estudio comparado de los valores de constantes de afinidad y de la estructura de los modelos de complejos y las energías de interacción calculadas, se investiga sobre las bases moleculares que definen el patrón de interacción y las diferentes fuerzas que operan entre proteína y ADN

3 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Equipo: P. ESPERÓN, C. SCAZZOCCHIO

Palabras clave: *Aspergillus nidulans* ADN interacciones factores transcripcionales



Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

#### **NEURONACH.HPC-GPC-MD (11/2011 - a la fecha)**

El Proyecto, diseñado en el marco de la línea de investigación NEURONACH, consiste en desarrollar estrategias de High Performance Computing utilizando arquitecturas que incluyan Graphics Unity Processors (GPUs) para llevar a cabo dinámicas moleculares de largo alcance de sistemas complejos incluyendo proteínas membranas y solvente. La aplicación de tal estrategia será realizada a modelos de receptores nicotínicos de acetil colina humanos.

2 horas semanales

Facultad de Química - PEDECIBA, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Equipo: Y GONZÁLES, P PEZZATI

Palabras clave: dinámica molecular nAChR HPC GPUs

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / High Performance Computing

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### **NEURONACH.LBDD: diseño de nuevos compuestos a ser desarrollados como antiparkinsonianos basados en agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina (03/2010 - a la fecha)**

El proyecto se basa en investigaciones desarrolladas previamente por nuestro grupo de investigación, en el marco de la línea de investigación NEURONACH. La propuesta se basa en el antecedente de que los receptores neuronales nicotínicos de acetilcolina son blancos terapéuticos promisorios para el desarrollo de nuevas herramientas farmacológicas para el tratamiento de diversos desórdenes neurológicos. Los receptores del subtipo  $\alpha 4\beta 2$  son los más relevantes debido a su abundancia y distribución, así como por las funciones fisiológicas que ellos modulan. Si bien se posee información sobre las características que hacen potente a un agonista nicotínico, no hay demasiadas evidencias a nivel estructural que puedan justificar tal comportamiento. Las estrategias de filtrado virtual a partir de bases de la base de datos Pubchem, dilucidación de farmacóforo y análisis cuantitativo estructura-actividad (QSAR), combinadas, permiten analizar en forma gráfica y estadística el tipo de propiedades asociadas a la estructura (descriptores) que puedan estar vinculados a la actividad.

8 horas semanales

Facultad de Química - PEDECIBA, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Maestría/Magister:1

Equipo: ABIN A, G. SILVA, A MILANO

Palabras clave: antiparkinsonianos Ligand Based drug design

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### **Maestría en Bioinformática (03/2008 - a la fecha)**

La Maestría en Bioinformática tiene como objetivos: Formación de RRHH de nivel de posgrado en Bioinformática y promoción de la interacción entre investigadores de las distintas vertientes que componen la Bioinformática. -Sustentar la formación de profesionales bioinformáticos de alto nivel tendiente a la formación de una plataforma de alto nivel en esta área de conocimiento. -Promoción de la interacción entre los centros académicos formadores de RRHH y los sectores empresariales (ej. industria Biotecnológica) generadores de demanda con vista a la futura inserción laboral.

10 horas semanales

CeBioinfo - DETEMA - Facultad de Química - UdeLaR, PEDECIBA - UdeLaR

Otra

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:42

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Comisión Académica de Posgrado, Uruguay, Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: F. IRIBARNE , M. VEGA , A MOMBURU (Responsable) , M PAULINO (Responsable) , M TORRE , F ALVAREZ , P EZZATTI , D WONSEVER , H NAYA , J TORT , E LESSA , J SOTELO , B GARAT , M SCAVINO , P GARCIA , A VICENTE , G GUERBEROFF , I NUÑEZ , P BERMOLÉN , P SMIRCICH , M GONZALEZ , L MORENO

Palabras clave: Bioinformática Maestría

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Extracción, análisis e identificación de carotenoides

#### **TARGETFISH.PHENOLS (03/2014 - a la fecha)**

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Beca

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Beca

Equipo:

Palabras clave: fenoles quercetina

#### **PROVITIS.NANO-Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas (06/2013 - a la fecha)**

8 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Beca

Universidad de la República, Uruguay, Remuneración

Equipo: P. MIRANDA , H. PARDO

Palabras clave: antiinflamatorios liposomas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica

#### **NEURONACH.CYT-Exploración de nuevos agonistas nicotínicos con selectividad por subtipo y modelización computacional de la interacción ligando-receptor (03/2004 - 06/2011)**

Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes trastornos neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las

energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epibatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de una serie de ligandos sintetizados con estructuras análogas a las (-) citisina la cual además fue tomada como prototipo para un tamizaje virtual que permitió proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

4 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Equipo: ABIN A (Responsable) , F. DAJAS

Palabras clave: nicotínicos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

**PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y uvas: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. (10/2008 - 10/2010 )**

El objetivo principal de este proyecto es el estudio y obtención a escala piloto, de un concentrado patronizado de polifenoles a partir de propóleos y uvas, cuyo contenido fenólico y capacidad antioxidante estarán documentados y certificados. Se están realizando los análisis de polifenoles totales en muestras vino tinto y propóleos, de capacidad antioxidante mediante técnicas de DPPH y ABTS+, obtención de un concentrado de vino tinto patronizado (contenido fijo de polifenoles totales), de un extracto hidro etanólico de propóleos por método de extracción a reflujo (Soxhlet), mezcla de concentrados y extractos y monitoreo del contenido final de polifenoles y capacidad antioxidante de los concentrados obtenidos.

16 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: CARMONA. P., S. AGUILERA-MORALES, L.A. CASTRO

Palabras clave: antioxidantes

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / antioxidantes en productos naturales

**Investigación, desarrollo e innovación en base a vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. (03/2008 - 06/2010 )**

PROVITIS.MEL-Esta propuesta de investigación, desarrollo e innovación, está inserta en el área de la Fitoquímica y su objetivo principal es la obtención de un extracto patronizado a partir de vino tinto, con propiedades antioxidantes analizadas y certificadas.

20 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: POZO. P., S. AGUILERA-MORALES, CARMONA. P., Y. RODRIGUEZ, AVALOS K, RODRIGUEZ A, NAVERO M

Palabras clave: antioxidantes

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / antioxidantes en productos naturales

**CHAGASPACE:Structure based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease. (01/2001 - 01/2007 )**

Este proyecto, ag inscripto dentro de la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, agrupó nuevas instituciones de diferentes países, a saber: Universidad Nacional de Costa Rica, Universidad EARTH (Costa Rica), Universidad de Birmingham, Alabama (USA), NASA (USA), Universidad de Santiago de Chile (UsaCh), Universidad Católica del Norte (UCN), Chile, Instituto Mario Fatała Chabén (Buenos Aires, Argentina) y la Universidad de la República (UdelaR). Se realizó un convenio multinacional a través del cual se desarrollaron investigaciones de búsqueda de nuevos compuestos activos contra la enfermedad de Chagas. Se realizaron "screenings" en las selva húmeda de Costa Rica y en el desierto de Atacama en Chile. Dichos extractos se analizaron en relación a su capacidad inhibitoria del crecimiento del parásito causante de la enfermedad de Chagas (*T. cruzi*), y de una enzima clave del stress oxidativo del tripanosoma, Ila tripanotiona reductasa (TR). También, se realizaron estudios in silico de moléculas con actividad inhibitoria en TR y su contraparte mamífera, la glutatión reductasa (GR). Se realizaron reuniones anuales en las cuales los resultados fueron discutidos y los planes rediseñados.

20 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Maestría/Magister prof:2

Doctorado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: E. ALVAREDA , S. AGUILERA-MORALES , F. IRIBARNE , R. CARRARO , O. TAPIA , GARCIA A , DE LUCAS L , KOHLMAN B , SEPULVEDA S

Palabras clave: Antichagásicos Biodiversidad tripanotiona reductasa

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de drogas

**PROPOLIS.CSIC-Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela (01/2005 - 01/2007 )**

La propuesta, incluida dentro de la línea de investigación PROVITIS, fue realizada en asociación con el Sector Productivo uruguayo (empresa TEPYVE, Sociedad Apícola Uruguaya, Fundación Zonamérica) consistió en la extracción de fenoles de propóleos y marcela y estudio de sus estructuras y propiedades antioxidantes.

20 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Maestría/Magister:1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: M. DUBIN , E. ALVAREDA , S. AGUILERA-MORALES , CEDRES M , L. CALDERÓN , ROJAS CH

Palabras clave: propóleos antioxidantes

**NEURODIABET.Modelizacion biomolecular: estudio de hormonas neuroendocrinas de interés en el área de salud, potenciales usos en el tratamiento de la obesidad y enfermedades neurodegenerativas (01/2006 - 01/2007 )**

Este proyecto consistió en simular mediante dinámica molecular en medio acuoso con una concentración de iones equivalentes a la del pH fisiológico, la estructura pequeñas hormonas neuroendocrinas, que son péptidos entre 30 y 40 , implicadas en la acción glucoreguladora, siendo por ello potenciales agentes terapéuticos en el control de diabetes y obesidad.

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Especialización:1

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero  
Equipo: C. DONNAMARÍA (Responsable)  
Palabras clave: diabetes obesidad hormona neuroendocrina

**CHAGASMEDCHIM.SARECNET-Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America. (01/1999 - 01/2001)**

Este emprendimiento fue desarrollado en base a la cantidad de recursos humanos especializados en el estudio de enfermedades parasitarias que se generaron durante la ejecución del proyecto anteriormente financiado por SAREC. En este caso, se consolidó una Red Temática para la formación de nuevos recursos humanos que pudieran seguir colaborando en el área de las enfermedades parasitarias en el cono Sur de Latino América.

10 horas semanales  
Facultad de Química - UdeLaR, DETEMA/LaBioFarMol  
Investigación  
Coordinador o Responsable  
Concluido

Financiación:  
Institución del exterior, Cooperación

Equipo:  
Palabras clave: parasitos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

**CHAGASMEDCHIM.CONICYT- Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos (04/1994 - 04/1996)**

Estudios de la relación estructura actividad de compuestos nitrofuránicos en las enzimas clave tripanotona y glutatión reductasa, utilizando herramientas de bioinformática estructural

20 horas semanales  
Facultad de Química - UdeLaR, DETEMA/LaBioFarMol  
Investigación  
Coordinador o Responsable  
Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2  
Especialización:2  
Maestría/Magister prof:1  
Equipo: F. IRIBARNE , O. TAPIA , STOPPANI AOM , N. HIKICHI , M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

**CHAGASMEDCHIM.CSIC-Modelado Gráfico y Estudio de las Propiedades Dinámicas de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. (06/1993 - 06/1995)**

Este proyecto forma parte de una serie de propuestas englobadas en un objetivo único que es el estudio in silico de biomoléculas asociadas a enfermedades parasitarias. En este caso, se desarrollaron las metodologías y protocolos para el modelado Gráfico y estudio mediante Dinámica Molecular de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. Ejemplo de ello: modelado y estudio de interacciones entre enzimas claves como tripanotona reductasa y glutatión reductasa, y sus sustratos naturales (tripanotona y glutatión).

20 horas semanales  
Facultad de Química - UdeLaR, DETEMA/LaBioFarMol  
Desarrollo  
Coordinador o Responsable  
Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2  
Especialización:2  
Doctorado:1  
Financiación:  
Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero  
Equipo: O. TAPIA , STOPPANI AOM , N. HIKICHI , M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

**CHAGASMEDCHIM.SAREC-Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host. (01/1991 - 01/1995 )**

Este fue el primero de nuestros emprendimientos dedicados al desarrollo de nuevas drogas antichagásicas. Se organizaron bases de datos, conteniendo estructuras moleculares con información de actividades antitripanosoma (como nitrofuranos), se calcularon y midieron sus propiedades fisicoquímicas y se realizaron estudios de la correlación estructura-actividad (QSAR). También, se implementaron las metodologías para el estudio gráfico y simulación de enzimas claves implicadas en los mecanismos tripanocidas, en este caso, en los mecanismos de stress oxidativo parásito y mamífero, como lo son la tripanotiona reductasa y la glutatión reductasa, respectivamente. Finalmente, se implementaron los estudios dirigidos a conocer la forma de unión de las drogas ya estudiadas por QSAR y las enzimas claves antes mencionadas, generándose complejos biomacromoleculares que se sometieron a estudios de anclaje (docking) y dinámica molecular.

20 horas semanales

Facultad de Química - UdeLaR , DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Especialización:2

Maestría/Magister prof:1

Doctorado:1

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: O. TAPIA , STOPPANI AOM , N. HIKICHI , M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de drogas

**CHAGASMEDCHIM.START-Diseño de nuevas drogas antichagásicas modelando su actividad frente a oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario (08/1991 - 12/1993 )**

Esta propuesta fue la primera de un conjunto de proyectos que conforman hasta la actualidad la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, dedicada a modelado y estudio por métodos in silico, de series de estructuras moleculares que pudieran luego de su selección a través de nuestra investigación, ser sugeridas como candidatos para el desarrollo de drogas antichagásicas. Las enzimas clave utilizadas para tal fin fueron oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario, y especialmente tripanotiona y glutatión reductasa.

20 horas semanales

Facultad de Química , DETEMA / LabioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Especialización:2

Maestría/Magister prof:2

Equipo: O. TAPIA , STOPPANI AOM , N. HIKICHI , M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de drogas

**DOCENCIA**

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2014 - a la fecha)**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Taller de Simulaciones Biomoleculares, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2014 - a la fecha)**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Diseño de Compuestos Bioactivos, 6 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

**Maestría en Bioinformática (09/2013 - 12/2013)**

Maestría  
Responsable  
Asignaturas:  
Bioinformática Estructural - Bioinformática II, 8 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (07/2013 - 07/2013)**

Doctorado  
Organizador/Coordinador  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2013 - 06/2013)**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Taller de Simulaciones Biomoleculares, 6 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2013 - 06/2013)**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Diseño de Compuestos Bioactivos, 6 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (06/2013 - 06/2013)**

Doctorado  
Organizador/Coordinador  
Asignaturas:  
Solving complex biological problems using free-energy calculations, 50 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Educación Permanente (04/2013 - 04/2013)**

Especialización  
Organizador/Coordinador  
Asignaturas:  
Extracción, separación e identificación de carotenoides: carotenoides en alimentación, nutrición y  
salud, 21 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica/ Carotenoides

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (09/2012 - 12/2012)**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Bioinformática Estructural - Bioinformática II, 8 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (05/2012 - 07/2012 )**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Diseño de Compuestos Bioactivos, 8 horas, Teórico-Práctico

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2012 - 05/2012 )**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Taller de Simulaciones Biomoleculares, 8 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Maestría en Bioinformática (09/2011 - 12/2011 )**

Maestría  
Organizador/Coordinador  
Asignaturas:  
Bioinformática II, 6 horas, Teórico-Práctico

**Maestría en Bioinformática (03/2011 - 06/2011 )**

Especialización  
Organizador/Coordinador  
Asignaturas:  
Diseño de Compuestos Bioactivos, 6 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Maestría en Bioinformática (09/2010 - 12/2010 )**

Maestría  
Responsable  
Asignaturas:  
Diseño de Compuestos Bioactivos, 8 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Maestría en Bioinformática - PEDECIBA (09/2010 - 09/2010 )**

Maestría  
Organizador/Coordinador  
Asignaturas:  
NAMD-FEP, 40 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2010 - 06/2010 )**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Diseño de Compuestos Bioactivos, 8 horas, Teórico-Práctico



**Maestría en Bioinformática - PEDECIBA (06/2010 - 06/2010 )**

Maestría

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

NAMD, 30 horas, Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Química Farmacéutica (07/2007 - 12/2007 )**

Grado

Asignaturas:

Bioinformática Estructural, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática, Biomoléculas

**Química Farmacéutica (03/2004 - 08/2007 )**

Grado

Asignaturas:

Introducción a la Bioinformática, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática

**Doctorado en Química (03/1998 - 08/2006 )**

Doctorado

Asignaturas:

Modelado Biomolecular, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacología, Biomoléculas, Modelado Molecular

**(06/2005 - 06/2005 )**

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Minicurso Apiterapia impartido durante el 1er Congreso de Apicultura del Mercosur. Punta del Este. 24-26 Junio 2005., 4 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**(02/2004 - 02/2004 )**

Especialización

Invitado

Asignaturas:

2.2.3.1 Farmacología y Modelado biomolecular aplicado al diseño de drogas para la enfermedad de Chagas. Febrero 2004. Centro de Capacitación y Perfeccionamiento Docente Prof. Juan E. Pivel Devoto, Montevideo, Uruguay., 8 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**(12/2003 - 12/2003 )**

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Investigación y desarrollo de fármacos antiprotozoarios: Estado Actual y nuevas Estrategias. Curso

Regional Investigación y Desarrollo de Fármacos Antiprotozoarios: estado actual y nuevas estrategias. Diciembre- 2003 AMSUD-Pasteur. Montevideo, 8 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**(09/1998 - 09/1998 )**

Técnico nivel superior

Invitado

Asignaturas:

Estructura Biomacromolecular. Noviembre 1998. Dictado en el Ciclo de los Sábados para la Enseñanza de la Química y sus Aplicaciones., 4 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**(11/1997 - 11/1997 )**

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

Mecánica, Dinámica y Farmacología Molecular, Reactividad Enzimática en Sitios Activos. Noviembre 1997. Universidad Federal de Sao Carlos., 10 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**(10/1997 - 10/1997 )**

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

"Modelado Molecular. Universidad de Chile Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Octubre 1997, 20 horas, Teórico-Práctico

**(09/1997 - 09/1997 )**

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

QUI.300-5.97 Tópicos en Físico-Química: Química Computacional aplicada al Modelado Molecular (Módulo 2). Universidad Federal de Sao Carlos. Septiembre 1997., 10 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**Doctorado en Química (03/1991 - 08/1997 )**

Doctorado

Asignaturas:

Modelado Molecular, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacología, Modelado Molecular

**(05/1997 - 05/1997 )**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Química Computacional Aplicada a Modelado Molecular: una introducción. Universidad Federal de Sao Carlos. Mayo 1997, 20 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**(09/1996 - 09/1996)**

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

2.2.2.2.5 Introducción al Modelado Molecular. Universidad de Chile. Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Septiembre 1996, 30 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**(08/1996 - 08/1996)**

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

2.2.2.2.6 Modelado Molecular. Universidad de Chile. Facultad de Ciencias. Agosto 1996, 40 horas, Teórico-Práctico

**Química Farmacéutica (03/1988 - 12/1990)**

Especialización

Asignaturas:

Farmacología Cuántica, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacología, Química Cuántica

**Química Farmacéutica (03/1976 - 03/1990)**

Grado

Asignaturas:

Mecánica Cuántica, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

**(10/1989 - 10/1989)**

Técnico nivel superior

Invitado

Asignaturas:

Diseño de fármacos asistido por computadoras. Octubre 1989. Curso Internacional de Química. Nivel Superior. En el marco del Centenario de la Asociación de Química y Farmacia del Uruguay., 4 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**Química Farmacéutica (03/1978 - 03/1989)**

Grado

Asignaturas:

Química Cuántica, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica

**Química Farmacéutica (03/1988 - 08/1988)**

Especialización

Asignaturas:

Investigación en el diseño de compuestos antichagásicos: Síntesis, estructura, bioquímica y teoría, 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas, diseño de drogas

**(12/1987 - 12/1987)**

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Diseño de Agentes Antichagásicos. Facultad de Química. 12-19 Diciembre 1987, 32 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**Química Farmacéutica (03/1986 - 08/1986)**

Grado

Asignaturas:

Simetría Molecular y Teoría de Grupos, 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica, Teoría de Grupos, Simetría Molecular

**Química Farmacéutica (03/1978 - 08/1978)**

Grado

Asignaturas:

Espectroscopia Molecular, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica, Espectroscopia

## **EXTENSIÓN**

**(03/2014 - a la fecha)**

Facultad de Química - UdelaR, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

4 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biología Humana

**Tutor del Proyecto de Extensión estudiantil PEB (Proyecto de Extensión en Bioinformática) realizado con el Liceo IPOLL de Salto (03/2011 - 03/2012)**

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural

2 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Construir, mirar y transformar moléculas jugando. Proyecto de Extensión realizado en conjunto con la Escuela Numero 35 Guatemala de Montevideo (07/2011 - 12/2011)**

Facultad de Química - PEDECIBA, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

1 hora

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

## **GESTIÓN ACADÉMICA**

**Titular por los investigadores de la Comisión Coordinadora del Área (02/2011 - a la fecha)**

Facultad de Química - PEDECIBA, PEDECIBA Química

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural

**Titular por el orden Docente (03/2010 - a la fecha )**

Facultad de Química, Claustro de la Facultad de Química  
Participación en cogobierno

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural

**Integrante Titular de la Comisión de Maestría (03/2010 - a la fecha )**

PEDECIBA, Maestría en Bioinformática

Gestión de la Enseñanza

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Coordinadora de la Maestría en Bioinformática (06/2011 - a la fecha )**

PEDECIBA, Maestría en Bioinformática

Gestión de la Enseñanza

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Titular por el orden Docente (03/2010 - a la fecha )**

Facultad de Química, Comisión de Dedicación Total

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural

**Representante titular por los G 3,4 y 5 del departamento (03/2010 - a la fecha )**

Facultad de Química, DETEMA

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Coordinadora de la subárea Físicoquímica (06/2013 - a la fecha )**

PEDECIBA, QUÍMICA

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Físicoquímica

**SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/ENSEÑANZA SUPERIOR - CHILE**

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

**Profesor visitante (03/2008 - 03/2010)**

Académico, 44 horas semanales / Dedicación total

**ACTIVIDADES**

**LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN**

**PROVITIS. Estudio de las propiedades antioxidantes de productos naturales autóctonos de Chile y Uruguay (03/2008 - 02/2010 )**

Extracción de fenoles a partir de propóleos, uvas y productos obtenidos de ellas uruguayos y chilenos. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolcateu, HPLC, HPLS-MS índice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y

FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Química y Farmacia, Coordinador o Responsable

Equipo: POZO. P., CARMONA. P., Y. RODRIGUEZ, ASENSIO M., V. ESPINOSA, REYES M.,

KESTERNICH V, STEGEN S, S. AGUILERA-MORALES, RODRIGUEZ A, H HRZICH

Palabras clave: antioxidantes, propóleos, QSAR antiinflamatorios antigotosos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Farmacoquímica, Antioxidantes, QSAR, Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

#### **NEURO.UCN-Bioinformática Estructural aplicada a enfermedades neurodegenerativas (03/2008 - 02/2010)**

Estudios in silico de receptores asociados a enfermedades neurodegenerativas

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Física, Coordinador o Responsable

Equipo: ABIN A, CASSELS B, F. DAJAS, PANZETTI F

Palabras clave: receptores nicotínicos citisinoideos parkinson problemas cognitivos alzheimer

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / desarrollo de drogas antiparkinsonianas

#### **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

##### **VITIS.UCN-MEL-Desarrollo de antioxidantes a partir de vinos chilenos (03/2008 - 03/2010)**

El proyecto tuvo como objetivo el desarrollo de extractos de productos naturales con alto valor agregado. Como actividades específicas tuvo: extracción de fenoles a partir de mezclas de vinos chilenos. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolateu, HPLC, HPLS-MSíndice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Química y Farmacia y Física

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: S. AGUILERA-MORALES, Y. RODRIGUEZ, KESTERNICH V, NAVERO M, K AVALOS, R NELSON

Palabras clave: antioxidantes vinos chilenos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

##### **PROVITIS-MEL (03/2008 - 03/2010)**

El proyecto tuvo como objetivo el desarrollo de extractos de productos naturales con alto valor agregado. Como actividades específicas tuvo: extracción de fenoles a partir de propóleos Uruguayos, vino, orujos y borras de uvas Chilenas. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolateu, HPLC, HPLS-MSíndice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Química y Farmacia

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:4

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: C. ACUÑA, S. AGUILERA-MORALES, Y. RODRIGUEZ, V. ESPINOSA, REYES M, NAVERO M, K AVALOS, H HRZICH

Palabras clave: propoleos uruguayos uvas chilenas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / obtención de antioxidantes y antiinflamatorios a partir de productos naturales

#### **CQTEQUINAS.UCN-Catequinas de plantas autóctonas uruguayas y chilenas (03/2008 - 03/2010 )**

Extracción de catequinas a partir de plantas autóctonas uruguayas y chilenas. Desarrollo de procesos extractivos y analíticos de contenido y capacidad antioxidantes. estudio del efecto de los extractos a nivel del metabolismo endógeno y sometido a situaciones patológicas

1 hora semanales

Facultad de Ciencias, Departamentos de Química y Física

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Institución del exterior, Otra

Equipo: KESTERNICH V (Responsable), NAVERO M

Palabras clave: plantas autóctonas catequinas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

#### **PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo (03/2008 - 03/2010 )**

El proyecto consistió en la recolección de 19 muestras de propóleos uruguayos, vinos chilenos, orujos y borras de vinos, a partir de los cuales se desarrollaron mezclas con alto contenido en polifenoles. La optimización de los procesos extractivos se hizo en base a medidas de la cantidad de fenoles totales (Folin Ciocalteu), capacidad antioxidantes (ABTS, DPPH) y medidas enzimáticas (xantin oxidasa). complementariamente, se investigaron los modos de unión y energías de unión por anclaje molecular de xantin oxidasa y los fenoles contenidos en los extractos.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamentos de Química, Química y Farmacia y Física

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: POZO. P., S. AGUILERA-MORALES, Y. RODRIGUEZ, NAVERO M, K AVALOS

Palabras clave: antioxidantes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

#### **DOCENCIA**

**(03/2008 - 03/2010 )**

Grado

Asignaturas:

Farmacología II, 6 horas, Teórico-Práctico

Química Farmacéutica III, 8 horas, Teórico-Práctico

Bioinformática Estructural, 6 horas, Teórico-Práctico

Farmacología I, 6 horas, Teórico-Práctico

Farmacología III, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Química Farmacéutica

### **OTRA ACTIVIDAD TÉCNICO-CIENTÍFICA RELEVANTE**

**Especialista convocada para consolidar enseñanza, investigación y extensión en Química Farmacéutica, bajo un proyecto financiado por un programa del MECESUP (Programa de Mejoramiento de la Calidad y Equidad de la Educación Superior) - CHILE (03/2008 - 03/2010)**

Universidad Católica del Norte - CHILE, Facultad de Ciencias  
40 horas semanales

#### **CARGA HORARIA**

Carga horaria de docencia: 16 horas

Carga horaria de investigación: 20 horas

Carga horaria de formación RRHH: 12 horas

Carga horaria de extensión: 2 horas

Carga horaria de gestión: 10 horas

## **Producción científica/tecnológica**

Me desempeño en actividades de investigación, desarrollo, innovación y extensión que vinculan áreas multidisciplinarias como Bioinformática, Farmacoquímica, Ciencias de la vida e Informática.

Instalé y dirijo el Centro de Bioinformática Estructural (CeBioinfo) del DETEMA-Facultad de Química-UdelaR, cuya función principal es la implementación de estrategias in silico y experimentales para la investigación, desarrollo e innovación de nuevos fármacos y macromoléculas biológicas asociadas a la salud humana.

Investigo en el Diseño de Biomoléculas y Compuestos Bioactivos estudiando su estructura y propiedades fisicoquímicas para ser desarrollados como fitonutrientes, fitofármacos o fármacos para enfermedades bacterianas, micosis, parasitarias (Chagas, Toxoplasmosis), Cáncer, Gota, Inflamación, neurodegenerativas (Parkinson, Alzheimer, Problemas Cognitivos). Desarrollamos conocimiento sobre antioxidantes (fenoles, carotenoides) extraídos de productos naturales, aportando respuestas a su relación con los desbalances del stress oxidativo, enfermedades oculares y nutricionales.

Sostenemos vínculos académicos regionales e internacionales: En Uruguay, con el IIBCE, Facultades de Química, Ciencias, Ingeniería e Institut Pasteur Montevideo. En Chile: USaCh, UChile, UCN, PUC, UAB. En Argentina: CIBIERG/UBA, Instituto de Parasitología Fátala Chabén. En Brasil FIOCRUZ y UFRJ; Costa Rica: EARTH; Suecia: U Uppsala; Francia: U Paris Sud. En Estados Unidos: U Birmingham-Alabama; Irlanda Trinity College Dublin; Alemania: Univ. Braunschweig, Berlin, OMS-PAHO. España:red CYTED IBERCAROT, Universidad de Sevilla, CSIC(Valencia), UK: University of Liverpool

Realizamos innovación y desarrollo con empresas uruguayas y chilenas: TEPYVE; Fundación Zonamérica; Sociedad Apícola Uruguaya; Red Apícola; Exportadores de Miel y Propóleos (Urimpex S.A.); DIPRODE, Cluster Apícola; Empresas Vitivinícolas (Loncomilla-San Javier -Chile, Carrau, productores), Bodegas Carrau y Boido, entre otras.

Con sectores académicos y empresariales, nacionales e internacionales hemos gestionado y participamos en proyectos de investigación, desarrollo e innovación financiados por fuentes nacionales e internacionales.

Soy responsable por la formación de recursos humanos, tarea altamente gratificante, tanto por la docencia directa como dirigiendo Tesis de grado y postgrado (4 doctorados, 2 maestrías y 4 grados finalizados, 4 postgrados y 4 grados en realización).

Participo del cogobierno universitario: Directora Suplente DETEMA; Suplente por el orden docente del Consejo de la Facultad de Química, Titular Comisión de Dedicación Total y COAED. S y Comisión Coordinadora del Área(CCA)-Química PEDECIBA, Coordinadora de cursos de postgrado-físicoquímica y Comisiones de ingresos.

Coordino la Maestría en Bioinformática UdelaR-PEDECIBA desde el 2009 y en la actualidad extendiendonos hacia el interior del país (Regional Norte, CURE) y el extranjero mediante del desarrollo de la modalidad semipresencial.



Durante el 2008-2009, realicé una estadía sabática en la Universidad Católica del Norte, Antofagasta-Chile, convocada por el Programa de Mejoramiento de la Calidad y Equidad de la Educación Superior (MECESUP) para promover el desarrollo de la enseñanza, investigación e innovación en Química Farmacéutica, Química-Física y Bioinformática. Esta experiencia, altamente gratificante y formativa, me ha interiorizado del sistema de investigación e innovación chileno y con los sectores empresariales, académicos, agencias e instituciones de innovación.

Siento una gran vocación por la Integración Participativa promoviendo actividades de extensión hacia el medio (Sector Productivo vitivinícola y apícola uruguayo y chileno) y tendiendo puentes entre los diferentes niveles de enseñanza, promoviendo actividades presenciales con docentes y estudiantes del Liceo No 1 IPOLL de Salto y Escuela Guatemala-Montevideo.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

##### **Structural Analysis and Molecular Docking of Trypanocidal Aryloxy-quinones in Trypanothione and Glutathione Reductases: A Comparison with Biochemical Data (Completo, 2017)**

B VERA, K. VAZQUEZ, C. MASCAYANO, R. TAPIA, V. ESPINOSA, J SOTO-DELGADO, C.O. SALAS, M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 35 8, p.:1785 - 1803, 2017

Palabras clave: tripanotona reductasa quinonas tripanosomicidas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2016.1195283](https://doi.org/10.1080/07391102.2016.1195283)

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

##### **Trypanothione Reductase: A Target for the Development of Anti-Trypanosoma cruzi drugs (Completo, 2017)**

K. VAZQUEZ, M. PAULINO ZUNINI, C.O. SALAS, ZÁRATE JJ, B VERA, RIVERA G

Mini Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 17 2017

Palabras clave: quinonas chagas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 13895575

DOI: [10.2174/1389557517666170315145410](https://doi.org/10.2174/1389557517666170315145410)

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

##### **Structural evidence of quercetin multi-target bioactivity: a reverse virtual screening strategy (Completo, 2017)**

D CARVALHO, M. PAULINO ZUNINI, POLTICELLI F, WILLIAMS R, ABIN JA

European Journal of Pharmaceutical Sciences, 2017

Palabras clave: quercetina Anclaje reverso nuevas dianas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09280987

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

##### **Combined Molecular Modelling and 3D-QSAR Study for Understanding the Inhibition of NQO1 by Heterocyclic Quinone Derivatives (Completo, 2017)**

LÓPEZ C, ALZATE J, M. PAULINO ZUNINI, MELLA J, C.O. SALAS, R. TAPIA, J SOTO

Chemical Biology and Drug Design, 2017

Palabras clave: quinonas cancer NQO1

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

Medio de divulgación: Papel

**Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: a G4 and M06-2X investigation (Completo, 2016)**

ALVAREDA E, DENIS P, IRIBARNE F, M. PAULINO ZUNINI  
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1091 p.:18 - 23, 2016  
Palabras clave: flavonoids Bond dissociation G4 M06-2X  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 2210271X  
DOI: [10.1016/j.comptc.2016.06.021](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2016.06.021)  
Scopus WEB OF SCIENCE™

**Unleashing the graphic processing units-based version of NAMD (Completo, 2016)**

GONZÁLEZ Y, EZZATTI O, M. PAULINO ZUNINI  
Bioinformatics and Biology Insights, v.: 9656 p.:639 - 650, 2016  
Palabras clave: NAMD GPU APOA1  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 11779322  
DOI: [10.1007/978-3-319-31744-1\\_56](https://doi.org/10.1007/978-3-319-31744-1_56)  
Scopus

**PROVITIS: Un consorcio entre la Ciencia y la Producción (Completo, 2015)**

M. PAULINO ZUNINI  
VOCES, v.: 464 2015  
Palabras clave: propolis orujos de uvas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos  
Medio de divulgación: Papel  
Lugar de publicación: Montevideo  
Escrito por invitación  
ISSN: 11303336  
[latindex](#)

**A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants (Completo, 2015)**

M VEGA TEIJIDO, M. PAULINO ZUNINI, C. LOPEZ, M.J. RODRIGO  
Revista Processos Químicos, v.: 9 18, p.:163 - 163, 2015  
Palabras clave: carotenoids citrus dioxygenase  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel  
Lugar de publicación: Goiania - Brazil  
ISSN: 19818521  
[www.rpqsenai.org.br](http://www.rpqsenai.org.br)

**New aryloxy-quinone derivatives as potential Anti-Chagasic agents: Synthesis, trypanosomicidal activity, electrochemical properties, pharmacophore elucidation and 3D-QSAR analysis (Completo, 2015)**

K. VAZQUEZ, CH ESPINOSA-BUSTOS, J SOTO-DELGADO, RA TAPIA, J. VARELA, E BIRRIEL, RODRIGO SEGURA, JAIME PIZARRO, H. CERECETTO, M GONZALEZ, M. PAULINO ZUNINI, CO SALAS  
RSC Advances, 2015  
Palabras clave: chagas quinones  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Medicina Química

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 20462069

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Antiinflammatory activity of phenolic compounds extracted from Uruguayan propolis and grape (Completo, 2015)**

E. ALVAREDA , P. MIRANDA , V. ESPINOSA , H. PARDO , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 33 1 , p.:129 - 129, 2015

Palabras clave: propolis phenols flavonoids grape pomace antiinflammatory

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2015.1032833](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1032833)

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1032833>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Synthesis and pharmacophore modelling of 2,6,9-trisubstituted purine derivatives and their potential role as apoptosis-inducing agents in cancer cell lines (Completo, 2015)**

CH ESPINOSA-BUSTOS , J CALDERÓN , A CAÑETE , RA TAPIA , M FAUNDEZ , MJ TORRES , A AGUIRRE , M. PAULINO ZUNINI , CO SALAS

Molecules, v.: 20 4 , p.:6808 - 6826, 2015

Palabras clave: purine apoptosis pharmacophore

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14203049

DOI: [10.3390/molecules20046808](https://doi.org/10.3390/molecules20046808)

[http://www.mdpi.com/journal/molecules/sections/medicinal\\_chemistry](http://www.mdpi.com/journal/molecules/sections/medicinal_chemistry)

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Towards the understanding of the molecular basis for the inhibition of COX-1 and COX-2 by phenolic compounds present in Uruguayan propolis and grape pomace (Completo, 2015)**

M. PAULINO ZUNINI , E. ALVAREDA , F. IRIBARNE , P. MIRANDA , V. ESPINOSA , S. AGUILERA-MORALES , H. PARDO

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2015

Palabras clave: propolis ciclooxigenase antiinflammatory effect phenols flavonoids grape pomace

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2015.1124808](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1124808)

<http://www.jbsdonline.com/jbsd-taken-over-taylor-and-francis-c4319.html>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Analysis of Cyclosporin A and a Set of Analogues as Inhibitors of a T. cruzi Cyclophilin by Docking and Molecular Dynamics (Completo, 2015)**

R. CARRARO , F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2015

Palabras clave: molecular dynamics cyclophilin chagas linear interaction energy (LIE)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Guilderland, NY, USA

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2015.1038584](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584)

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents (Completo, 2014)**

R. TAPIA , C.O. SALAS , K. VAZQUEZ , CH ESPINOSA-BUSTOS , J SOTO-DELGADO , J. VARELA , E BIRRIEL , H. CERECETTO , M GONZALEZ , M. PAULINO ZUNINI  
Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 24 16, p.:3919 - 3922, 2014  
Palabras clave: chagas indolquinonas farmacóforo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 0960894X

Ms. Ref. No.: BMCL-D-14-00714R1 Title: Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters Dear Dr Tapia, I am pleased to notify you that your manuscript "Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents" has been accepted for publication in Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. When your paper is published on ScienceDirect, you want to make sure it gets the attention it deserves. To help you get your message across, Elsevier has developed a new, free service called AudioSlides: brief, webcast-style presentations that are shown (publicly available) next to your published article. This format gives you the opportunity to explain your research in your own words and attract interest. You will receive an invitation email to create an AudioSlides presentation shortly. For more information and examples, please visit <http://www.elsevier.com/audioslides>. Thank you for submitting your work to Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. With kind regards, Dale L. Boger, Ph.D. Editor-in-Chief Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Towards an Understanding of Mesocostoides vogae Fatty Acid Binding Proteins Roles (Completo, 2014)**

G. ALVITE , N GARRIDO , A KUN , M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES  
PLoS ONE, v.: 9 10 e111204, p.:1 - 11, 2014

Palabras clave: FABPs Mecosetoides Vogae

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de parásitos

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Canada

ISSN: 19326203

[www.plosone.org](http://www.plosone.org)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS (Z/E) ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO. TECHNOLOGICAL AND NUTRITIONAL IMPLICATIONS (Completo, 2014)**

A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ , M. PAULINO ZUNINI , C STINCO , P MAPELLI-BRAHM , X-D. WANG  
Journal of Agricultural and Food Chemistry, v.: 62 p.:12399 - 12406, 2014

Palabras clave: carotenoides, bioinformatica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00218561

DOI: [10.1021/jf5041965](https://doi.org/10.1021/jf5041965)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions (Completo, 2013)**

P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 00 00 00, 2013

Palabras clave: Aspergillus nidulans Zinc finger DNA-protein interaction TGEK Linker

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformatica estructural, análisis conformacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: UK

ISSN: 07391102

DOI: [\[Epub ahead of print\]](#) PMID: 24125468 [\[PubMed - a](#)

<http://www.tandfonline.com/toc/tbsd20/current#.Ui4zvsYreul>

08-Sep-2013 Dear Dr Paulino: Ref: In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions We are pleased to accept your paper in its current form which will now be forwarded to the publisher for copy editing and typesetting. You will receive proofs for checking,

and instructions for transfer of copyright in due course. The publisher also requests that proofs are checked through the publishers tracking system and returned within 48 hours of receipt. Thank you for your contribution to Journal of Biomolecular Structure & Dynamics and we look forward to receiving further submissions from you. Sincerely, Professor Sarma Editor in Chief, Journal of Biomolecular Structure & Dynamics rhs07@albany.edu

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs (Completo, 2013)**

A. ESTÉVES, M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 31 2, p.:224 - 239, 2013

Palabras clave: E granulosus, FABPs, bioinformatica estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2012.698246](https://doi.org/10.1080/07391102.2012.698246)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Flavonoides en Productos Naturales - Entrevista a Margot Paulino Zunini realizada por Javier Taks (Completo, 2011)**

J. TAKS, M. PAULINO ZUNINI

Trama. Revista de Cultura y Patrimonio, v.: 3 p.:86 - 99, 2011

Palabras clave: antioxidantes marcela

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Sociología / Antropología, Etnología / Antropología Social

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Montevideo

Escrito por invitación

ISSN: 16886348

latindex

**Phenolic contents and antioxidant activity in central southern Uruguayan propolis extracts. (Completo, 2010)**

M. PAULINO ZUNINI, C. ROJAS, S. DEPAULA, I. ELINGOLD, E. ALVAREDDA, M.B. CASANOVA, F. IRIBARNE, S. AGUILERA-MORALES, M. DUBIN

Journal of the Chilean Chemical Society, v.: 55 1, p.:141 - 146, 2010

Palabras clave: antioxidantes propolis

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Chile

ISSN: 07179707

Scopus® WEB OF SCIENCE™ latindex 

**In silico characterization of cytisinoids docked into an Acetylcholine Binding Protein. (Completo, 2010)**

A. ABIN-CARRIQUIRY, M. PAULINO ZUNINI, B. K. CASSELS, S. WONNACOTT, F. DAJAS

Bioorganic & Medicinal Chemistry, v.: 20 p.:3683 - 3687, 2010

Palabras clave: nicotínicos in silico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Amsterdam

ISSN: 09680896

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Assaying phenothiazine derivatives as trypanothione reductase and glutathione reductase inhibitors by theoretical docking and Molecular Dynamics studies (Completo, 2009)**

F. IRIBARNE, M. PAULINO ZUNINI, S. AGUILERA-MORALES, O. TAPIA

Journal of molecular graphics & modelling, v.: 28 p.:371 - 381, 2009

Palabras clave: Chaga's disease Phenothiazines trypanothione reductase binding affinity theoretical docking molecular dynamics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

DOI: [10.1016/j.jmgm.2009.09.003](https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2009.09.003)

[www.elsevier.com/locate/JMGM](http://www.elsevier.com/locate/JMGM)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Studies of Tripanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure-activity Relationships (Completo, 2008)**

M. PAULINO ZUNINI , E.M. ALVAREDA , P. A. DENIS , E. J. BARREIRO , G.M. SPERANDIO DA SILVA , M. DUBIN , C. GASTELLÚ , S. AGUILERA , O. TAPIA

European Journal of Medical Chemistry, v.: 43 10, p.:2238 - 2246, 2008

Palabras clave: trypanocides naphthoquinones

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 02235234

(Publicado on-line) EJMC3034. PMID: 18276039

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Interaction energies of nitrofurans with trypanothione reductase and glutathione reductase studied by molecular docking (Completo, 2007)**

F. IRIBARNE , H. CERECETTO , M. GONZÁLES , S. AGUILERA , O. TAPIA , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 818 p.:7 - 22, 2007

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Modelling and study of cyclosporin A and related compounds complexes with a Trypanosoma cruzi cyclophilin (Completo, 2007)**

R. CARRARO , J. BÚA , A. RUIZ , M. PAULINO ZUNINI

Journal of molecular graphics & modelling, v.: 26 p.:48 - 61, 2007

Palabras clave: Trypanosoma cruzi ciclofilina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**The chemotherapy of Chaga's disease: An overview (Completo, 2005)**

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. DUBIN , S. AGUILERA-MORALES , O. TAPIA , A.O.M. STOPPANI

Mini Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 5 p.:173 - 183, 2005

Palabras clave: chagas quimioterapia del chagas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 13895575

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción.

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Docking and molecular dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites (Completo, 2002)**

F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , S. AGUILERA , M. MURPHY , O. TAPIA

Journal of Molecular Modeling, v.: 5 p.:173 - 183, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09485023

. F. Iribarne, M. Paulino, S. Aguilera, M. Murphy, O. Tapia, J. Mol. Mod., (2002), 5:173-183.

Scopus<sup>®</sup>

**Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds. (Completo, 2002)**

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. HANSZ , N. HIKICHI , M. VEGA , G. SEOANE , H. CERECETTO , R. DI MAIO , I. CARACELLI , I. ZUKERMAN-SCHPECTOR , C. OLEA-AZAR , P. MIRANDA , M. BERRIMAN , A.H. FAIRLAMB , O. TAPIA

Journal of Molecular Structure, v.: 584 p.:95 - 105, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222860

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Modelling CreA protein-DNA recognition determinants. A molecular dynamics study of fully charged CreA-DNA model in water. (Completo, 2002)**

M. PAULINO ZUNINI , M. VEGA , P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO , O. TAPIA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 584 p.:225 - 242, 2002

Palabras clave: Aspergillus nidulans CreA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

M. Paulino, M. Vega, P. Esperón, C. Scazzocchio and O. Tapia J. Mol. Struct. (TEOCHEM), (2002), 584:

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Relaxation dynamics of biopolymers seeded with unfolded lysozyme transients in vacuo. The role of primary sequence in protein folding (Completo, 2001)**

G. A. ARTECA , M. PAULINO ZUNINI , C.T. REINMANN , O. TAPIA

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 2 p.:5259 - 5267, 2001

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14639076

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Hydride Transfer Transition Structure as an Unifying Redox Step for Describing the Branched Kinetics of Glutathione Reductase. Molecular-Electronic Antecedents. (Completo, 2000)**

F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 103 p.:451 - 462, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 1432881X

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Recognition determinants in T4«G4 mutant derived from a (5« GCGTGGGCGT-«4) oligomer in a Zif268-DNA complex. A molecular dynamics study of the fully charged complex in water. (Completo, 2000)**

G. ROXSTROM , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA  
Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 104 p.:96 - 108, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 1432881X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Cytotoxicity of lipophilic o-naphthoquinones: structure-activity relationships (Completo, 2000)**

A.O.M. STOPPANI , S. GOIJMAN , M. DUBIN , S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL , M.P. MOLINA  
PORTELA , A.M. BISCARDI , M. PAULINO ZUNINI

Comparative biochemistry and physiology. Toxicology & pharmacology, v.: 7 p.:1 - 16, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 15320456

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Molecular cloning, sequencing and expression of a serine proteinase inhibitor gene from Toxoplasma gondii. (Completo, 2000)**

V. PSZENNY , S.O. ANGEL , M. PAULINO ZUNINI , B. LEDESMA , E. GUARNERA , A.M. RUIZ , E.  
BONTEMPI

Molecular and Biochemical Parasitology, v.: 107 p.:241 - 249, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01666851

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Synthesis and anti-trypanosomal evaluation of E-isomers of 5-nitro-2 furaldehyde and 5-nitrothiophene-2-carboxaldehyde semicarbazone derivatives. Structure-activity relationships. (Completo, 2000)**

H. CERECETTO , R. DI MAIO , M. GONZALEZ , M. RISSO , G. SAGRERA , G. SEOANE , A.  
DENICOLA , G. PELUFFO , C. QUIJANO , A. O. M. STOPPANI , M. PAULINO ZUNINI , C. OLEA-  
AZAR , M. A. BASOMBRÍO

European Journal of Medical Chemistry, v.: 35 p.:343 - 350, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 02235234

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Molecular Dynamics Simulation of a Zif268-DNA Complex in Water. Spatial Patterns and Fluctuations Sensed from a Nanosecond Trajectory. G (Completo, 1998)**

G. ROXTROM , I. VELÁZQUEZ , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Journal of Chemical Physics, v.: 102 p.:1828 - 1832, 1998

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 00219606

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**DNA Structure and Fluctuations Sensed from a 1.1ns Molecular Dynamics TRajjectory of a Fully Charged Zif268-DNA Complex in Water. G (Completo, 1998)**

G. ROXSTROM , I. VELÁZQUEZ , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 2 p.:301 - 302, 1998

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel



ISSN: 07391102

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Synthesis and Anti-Trypanosomal Activity of Novel 5-Nitro-2-furaldehyde and 5-Nitrothiophene-2-carboxaldehyde Semicarbazones Derivatives (Completo, 1998)**

H. CERECETTO , R. DI MAIO , G. IBARRURI , G. SEOANE , A. DENICOLA , C. QUIJANO , C. PELUFFO , M. PAULINO ZUNINI

Farmaco, v.: 53 p.:84 - 94, 1998

Palabras clave: chagas anti tripanosoma semicarbazonas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Francia

ISSN: 0014827X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Modelling a 3D Structure for EgDf1 from Echinococcus granulosus. Putative epitopes, phosphorylation motifs and ligand. (Completo, 1998)**

M. PAULINO ZUNINI , A. ESTEVES , M. VEGA , G. TABARES , R. EHRLICH , O. TAPIA

Journal of Computer-Aided Molecular Design, v.: 12 p.:351 - 360, 1998

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 0920654X

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Remarks on the Phylogeny and Structure of Fatty Acid Binding Proteins from Parasitic Platyhelminths (Completo, 1997)**

A. ESTEVES , M. PAULINO ZUNINI , L. JOSEPH , R. EHRLICH

International Journal for Parasitology, v.: 27 p.:1013 - 1023, 1997

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207519

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**A new analogue of Nifurtimox (Completo, 1996)**

I. CARACELLI , F.M.L.G. STAMATO , B. MESTER , M. PAULINO ZUNINI , H. CERECETTO

Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications, v.: 52 p.:1281 - 1282, 1996

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01082701

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Transition structure and reactive complexes for hydride transfer in an isoalloxazine-nicotinamide complex. On the catalytic mechanism of a glutathione reductase. An ab initio MO SCF study. (Completo, 1996)**

W. DIAZ , J.M. AULLO , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Journal of Chemical Physics, v.: 204 p.:195 - 203, 1996

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

ISSN: 00219606

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Oxygen radicals and the chemotherapy of Chagas's disease: an overview (Completo, 1996)**

A.O.M. STOPPANI , M. PAULINO ZUNINI , M. DUBIN

Ciência e Cultura, v.: 48 1 2, p.:75 - 86, 1996

Palabras clave: free radicals chaga's disease

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 00096725  
[http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?script=sci\\_serial&lng=en&pid=0009-6725&nrm=iso](http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?script=sci_serial&lng=en&pid=0009-6725&nrm=iso)  
**latindex**

**Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. 2. Proteinases and Receptor and Transport Proteins. (Completo, 1995)**

M. PAULINO ZUNINI , F.M.L.G. STAMATO , R. GARRAT , C.M. SOARES  
Molecular Engineering, v.: 4 p.:375 - 414, 1995  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 09255125

**A Molecular Dynamic Study of Structure of glutathione reductase. (Completo, 1995)**

N. HIKICHI , M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , O. TAPIA  
Journal of Molecular Structure, v.: 335 p.:243 - 254, 1995  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 00222860  
**Scopus** WEB OF SCIENCE\*

**Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. Theory and applications to enzyme active-site-directed drug design. (Completo, 1994)**

O. TAPIA , M. PAULINO ZUNINI , F.M.L.G. STAMATO  
Molecular Engineering, v.: 3 p.:377 - 414, 1994  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 09255125

**A computer Model Built Structure of the T. Congolense Trypanothione Reductase in Complex with NADP (Completo, 1992)**

E. HORJALES , B. OLIVA , F.M.L.G. STAMATO , M. PAULINO ZUNINI , O. NILSSON  
Molecular Engineering, v.: 1 p.:357 - 375, 1992  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 09255125

**Propiedades Electrónicas y actividad redox de naftoquinonas (Completo, 1992)**

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , G. TABARES , MP MOLINA PORTELA , S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL , C SREIDER , AOM STOPPANI  
Anales de la Sociedad Científica Argentina, v.: 82 5, p.:379 - 389, 1992  
Palabras clave: naftoquinonas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química  
Medio de divulgación: Papel  
Lugar de publicación: Buenos Aires Argentina  
ISSN: 00378437  
3.1.31 M. Hansz; N. Hikichi; G. Tabares; M.P.Molina Portela; S.H.Fernandez Villamil; C.M. Sreider; A

**Electronic Properties and Free Radical Production by Nitrofurán Compounds. (Completo, 1992)**

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , A.O.M. STOPPANI

Free Radical Research, v.: 16 p.:207 1992

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10715762

**Novel approach to the study of the mode of action of new antichagasic chemicals (Completo, 1992)**

M. PAULINO ZUNINI , F. STAMATO , A.O.M STOPPANI , O. TAPIA

Memórias do Instituto Oswaldo Cruz, v.: 87 II, p.:76 1992

Palabras clave: antichagasic mode of action

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00740276

Scopus® WEB OF SCIENCE™ latindex

**Inhibition of Microsomal Lipid Peroxidation and Cytocrome P-450 Catalyzed Reactions by Nitrofurán Compounds (Completo, 1991)**

M. DUBIN , S. FERNÁNDEZ , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M. STOPPANI

Free Radical Research, v.: 14 p.:419 - 431, 1991

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10715762

**Quantitative Structure Activity Relationships of 5-Nitrofurán Derivatives (Completo, 1990)**

B. MESTER , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. PAULINO ZUNINI

Chomatographia, v.: 30 p.:191 1990

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00095893

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Acción del ketoconazol sobre un modelo experimental agudo de infección por Trypanosoma cruzi. (Completo, 1990)**

E. CIVILA , R. SALVATELLA , R. MANCEBO , R. ROSA , Y. BASMADJIAN , G. MENDARO , M.

FERNÁNDEZ , G. SARROCA , M. PAULINO ZUNINI , S. CASSERONE , G. PÉREZ BORMIDA

Revista Uruguaya de Patología Clínica, v.: 22 p.:405 1990

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00350559

**Theoretical studies of Hydrogen-bonded complexes : using semiempirical methods. (Completo, 1990)**

E.L. COITIÑO , K. IRVING , J. RAMA , A. IGLESIAS , M. PAULINO ZUNINI , O.N. VENTURA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69 p.:405 - 415, 1990

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel  
Lugar de publicación: Facultad de Química - Udelar  
ISSN: 01661280

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Molecular Modelling of Glutathione : A Comparison with Crystallographic Data. (Completo, 1990)**

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , O.N. VENTURA

Journal of Molecular Structure, v.: 210 p.:467 1990

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222860

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Estudio mecánico-cuántico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones. (Completo, 1979)**

M. PAULINO ZUNINI , R.M. SOSA

Anales de La Facultad de Química de Montevideo, v.: 9 p.:28 1979

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07971400

**NO ARBITRADOS**

**Identification of novel CAP superfamily protein members of Echinococcus granulosus protoscoleces (Completo, 2016)**

M C SALAVERRY , A COSTÁBILE , S ECHAVERRIA , ESTELA CASTILLO , M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES

Acta Tropica, 2016

Palabras clave: Echinococcus granulosus

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /  
Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 0001706X

DOI: [10.1016/j.actatropica.2016.02.011](https://doi.org/10.1016/j.actatropica.2016.02.011)

**Una nueva estrategia en la lucha contra la Enfermedad de Chagas : modelado molecular adaptado al diseño de quimioterápicos de baja toxicidad. M.Paulino de Blumenfeld. Intercambio. 1 (1990) 4. Revista no Arbitrada (Completo, 1990)**

M. PAULINO ZUNINI

Intercâmbio, v.: 1 p.:4 1990

Palabras clave: Chagas, nuevos fármacos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Montevideo

ISSN: 0873366X

**ARTÍCULOS ACEPTADOS**

**NO ARBITRADOS**

**Preparation and Characterization of Tannat Grape Pomace Extract Liposomes (Completo, 2016)**

P. MIRANDA , M. PAULINO ZUNINI , A. GAMBARO , A. ROASCIO , ÁLVARO W. MOMBRÚ ,  
ALEJANDRA RODRÍGUEZ-HARALAMBIDES , MAURICIO ARGIMÓN , PATRICIA ZIMET , IRIS  
MIRABALLES , H. PARDO

Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2016

Palabras clave: fenoles liposomas tannat orujos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos

Fecha de aceptación: 14/04/2015

ISSN: 00218561

## LIBROS

### **En-clave Inter: Educación superior e Interdisciplina ( Participación , 2015)**

M. PAULINO ZUNINI

Número de volúmenes: 6

Edición: ,

Editorial: Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República, Montevideo

Tipo de publicación: Divulgación

Referado

En prensa

Escrito por invitación

Palabras clave: Bioinformática

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformatica

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN: 9789974012912

Financiación/Cooperación:

Comisión Académica de Posgrado / Apoyo financiero, Uruguay

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero, Uruguay

[http://www.ei.udelar.edu.uy/renderPage/index/pageId/976#heading\\_5866](http://www.ei.udelar.edu.uy/renderPage/index/pageId/976#heading_5866)

Capítulos:

Creación y Evolución de dos posgrados Interdisciplinarios PEDECIBA-UdelaR: Maestría y Diploma de Especialización en Bioinformática

Organizadores: Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República

Página inicial 51, Página final 58

### **Reporte sobre la Enfermedad de Chagas del Grupo de Trabajo Científico. Programa Especial de Investigaciones y Enseñanzas sobre Enfermedades Tropicales (TDR) /SWG/09 ( Libro compilado Revista , 2007)**

M. PAULINO ZUNINI , R. RADII , L. FLOHE

Número de volúmenes: 1

Número de páginas: 83

Edición: ,

Editorial: Organización Mundial de la Salud, Ginebra

Palabras clave: Enfermedad de Chagas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Enfermedad de Chagas

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN:

Financiación/Cooperación:

Institución del exterior / Cooperación,

[www.who.int/tdr](http://www.who.int/tdr)

### **Molecular Biochemical and Immunological Approaches to Parasitic Diseases. ( Participación , 1997)**

M. PAULINO ZUNINI

Número de volúmenes: 1

Edición: ,

Editorial: Edilce, Montevideo

Palabras clave: chagas antichagasic

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN:

Financiación/Cooperación:

Capítulos:

Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian host

Organizadores: Swedish Agency for Research Cooperation with Developing Countries (SAREC).

Ricardo Ehrlich, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay

Página inicial 90, Página final 95

**Biology of Parasitism ( Participación , 1994)**

M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Edición: ,

Editorial: Editorial Trilce, Montevideo

Palabras clave: Computer simulations, molecular graphics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular, Enfermedad de chagas

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN:

Financiación/Cooperación:

Institución del exterior / Cooperación,

Capítulos:

Computer simulations and molecular graphics modeling. The 3-D structure of transport proteins.

Organizadores: R. Ehrlich and A. Nieto

Página inicial 249, Página final 263

**The Chemistry of the XXI Century. Molecular Modelling. ( Participación , 1992)**

M. PAULINO ZUNINI , F.M.L.G. STAMATO , E. HORJALES , N. HIKICHI , M. HANSZ , B. OLIVA , O. NILSSON , O. TAPIA

Edición: ,

Editorial: Editorial World Scientific., NY

Palabras clave: Molecular Modelling, antichagasic

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular, Enfermedad de chagas

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN:

Financiación/Cooperación:

Institución del exterior / Cooperación,

Capítulos:

Molecular Modelling as a tool to help design selective antichagasic drugs

Organizadores: Marco A.C. Nascimento

Página inicial 131, Página final 152

**DOCUMENTOS DE TRABAJO**

**Informes de avance y final del Proyecto Maestría en Bioinformática ANII-PEDECIBA 2010-2015 (2015)**

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: Bioinformática

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: Papel

**Informes final de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2003, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE, Agosto 2003. (2003)**

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Serie: 1, v: 1

Costa Rica

Palabras clave: ChagaSpace

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: CD-Rom

**Informe de avances de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2002, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE (2002)**

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Serie: 1, v: 1

Costa Rica

Palabras clave: ChagaSpace

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: CD-Rom

**PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS**

**Unleashing the Graphic Processing Units-based version of NAMD (2015)**

Completo

Y GONZÁLES, PEZZATTI, M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional

Descripción: The 13th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA-15) Helsinki, Finland, 20-22 August, 2015

Ciudad: HELSINKI

Año del evento: 2015

Publicación arbitrada

Palabras clave: NAMD ACCELERATED MOLECULAR DYNAMICS

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Enseñanza de postgrado en Bioinformática

**A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants. (2015)**

Resumen expandido

VEGA-TEIJIDO M, M. PAULINO ZUNINI, LOPEZ C, RODRIGO MJ

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Simposio Brasileiro de Química Teórica - SBQT 2015

Ciudad: Pirenópolis - GO Brasil

Año del evento: 2015

Palabras clave: molecular dynamics carotenoides CCD4a Molecular modelling

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: Papel

**Modeling studies of CCD4a of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants (2015)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO M, M. PAULINO ZUNINI, LOPEZ C, RODRIGO MJ

Evento: Internacional

Descripción: Fitoquímicos en Agroalimentación Salud

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Escrita por invitación

Palabras clave: molecular dynamics carotenoides CCD4a Molecular modelling

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

**ACTIVIDAD ANTI-INFLAMATORIA DE COMPUESTOS FENÓLICOS EXTRAÍDOS DE PROPÓLEOS Y ORUJOS DE UVA URUGUAYOS: ENSAYOS IN VITRO E IN SILICO (2015)**

Resumen

ALVAREDA E , IRIBARNE F , ESPINOSA V , MIRANDA P , PARDO H , AGUILERA S , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: Fitoquímicos en Agroalimentación Salud  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2015  
Publicación arbitrada  
Escrita por invitación  
Palabras clave: fenoles ciclooxigenasa COX-2 COX-1  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /  
Medio de divulgación: Papel

**Identificación de blancos de acción molecular de quercetina mediante tamizaje reverso (2015)**

Resumen  
CARVALHO D , ABIN-CARRIQUIRY A , ARREDONDO F , POLTICELLI F , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: Fitoquímicos en Agroalimentación Salud  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2015  
Publicación arbitrada  
Escrita por invitación  
Palabras clave: quercetina tamizaje reverso  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /  
Medio de divulgación: Papel

**Acoplamiento molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa (2015)**

Resumen  
B VERA , K. VAZQUEZ , M. PAULINO ZUNINI , C.O. SALAS

Evento: Internacional  
Descripción: 1er CONGRESO INTERNACIONAL DE VECTORES Y DEL Trypanosoma cruzi: PANORAMA ACTUAL Y EXPECTATIVAS  
Ciudad: Guanajato Mexico  
Año del evento: 2015  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: tripanotona reductasa quinonas Glutation Reductasa acoplamiento  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química  
Medio de divulgación: Papel

**Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa (2015)**

Resumen  
B VERA , K. VAZQUEZ , C.O. SALAS , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: Simposium en Química Medicinal y Farmacéutica  
Ciudad: C.F. México  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: tripanotona reductasa quinonas Glutation Reductasa tripanocidas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química  
Medio de divulgación: Papel

**An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus (2015)**

Completo  
M. PAULINO ZUNINI , M. VEGA , C. LOPEZ , M.J. RODRIGO



Evento: Internacional  
Descripción: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina  
Ciudad: Torino - Italia  
Año del evento: 2015  
Publicación arbitrada  
Escrita por invitación  
Palabras clave: carotenoids  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural  
www.chitel2015.org

**Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa: una comparación con datos bioquímicos (2015)**

Resumen  
B VERA, K. VAZQUEZ, M. PAULINO ZUNINI, C.O. SALAS

Evento: Internacional  
Ciudad: Mexico D.F.  
Año del evento: 2015  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: quinonas chagas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Análisis estructural y anclaje molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotion reductasa y glutatión reductasa (2014)**

Resumen  
B VERA, V VILLAMIL, K. VAZQUEZ, J SOTO, C.O. SALAS, M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional  
Descripción: Encuentro de la Sociedad Uruguaya de Biociencias  
Ciudad: Maldonado - Piriápolis  
Año del evento: 2014  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: tripanotiona reductasa Glutation Reductasa Anclaje reverso o-quinona tripanosoma cruzi  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Assaying Cyclosporin A and a set of analogues as inhibitors of a T. cruzi cyclophilin by docking and Molecular Dynamics (2014)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI, R. CARRARO, F. IRIBARNE

Evento: Internacional  
Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists  
Ciudad: Santiago de Chile  
Año del evento: 2014  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: cyclosporin cyclophilin Trypanosoma cruzi  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Otros  
watoc2014.com

**Quercetin Target Identification by Reverse Virtual Screening (2014)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI, D CARVALHO, ABIN A, F ARREDONDO

Evento: Internacional  
Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists  
Ciudad: Santiago de Chile  
Año del evento: 2014  
Palabras clave: quercetin reverse virtual screening  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Otros  
watoc2014.com

**Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies (2014)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO

Evento: Internacional  
Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists  
Ciudad: Santiago de Chile  
Año del evento: 2014  
Palabras clave: Aspergillus nidulans CreA  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Otros  
watoc2014.com

**Modeling, Docking and Molecular Dynamics studies of CCD4a with three carotenoids substrates. (2014)**

Resumen  
M. VEGA , C. LOPEZ , M.J. RODRIGO , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists  
Ciudad: Santiago de Chile  
Año del evento: 2014  
Palabras clave: carotenoids CCD4a  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Otros  
watoc2014.com

**2-ArYloxYnaphthoquinone derivatives as anti-Chagasic agents: study of trypanocidal effect, selectivity, pharmacophoric map and 3D-QSAR (2014)**

Resumen  
R. TAPIA , C.O. SALAS , K. VAZQUEZ , J. SOTO , M. PAULINO ZUNINI , J. VARELA , M. GONZALEZ , H. CERECETTO

Evento: Internacional  
Descripción: EFMC-ISMIC 2014 - XXIII International Symposium on Medicinal Chemistry (EFMC-ISMIC 2014)  
Ciudad: Lisboa - Portugal  
Año del evento: 2014  
Palabras clave: 2-ArYloxYnaphthoquinone Chagas disease  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química  
Medio de divulgación: Papel  
<http://www.allconferences.com/c/efmc-ismc-2014-xxiii-international-symposium-on-medicinal-chemistry->

**STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO (2013)**

Resumen expandido  
A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ , M. PAULINO ZUNINI , C. STINCO , X-D. WANG

Evento: Internacional  
Descripción: Pigments In Foods VII

Ciudad: Novara, Italia  
Año del evento: 2013  
Anales/Proceedings: Pigments in Foods VII Congress, held in Novara, Italy, on 18-21 June 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: carotenoides  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional  
Medio de divulgación: CD-Rom  
(<http://pif2013.org/>)

**Synthesis and docking studies of new aryloxy heterocyclic quinones as potential trypanosomicidal agents (2013)**

Resumen  
R. TAPIA , C.O. SALAS , K. VAZQUEZ , CH. ESPINOSA , J. VARELA , M. GONZÁLES , H. CERECETTO , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: IUPAC World Chemistry Congress 2013 on 11-16 August 2013 in Istanbul, Turkey  
Ciudad: Istanbul  
Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: tripanotona reductasa Trypanosoma cruzi quinonas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos  
Medio de divulgación: Internet  
<http://www.AbstractAgent.com/2013iupac>

**Estudios in silico de la interacción de BCO1 con carotenoides de origen vegetal (2013)**

Resumen  
R. RODRIGUEZ , E. PAZOS , M. PAULINO ZUNINI , M. VEGA , A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ

Evento: Nacional  
Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: carotenoides, bioinformática BCMO1  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Modelado por Homología, Anclaje y Dinámica Molecular de tres Dioxigenasas de Rotura de Carotenoides de Cítricos de la Subfamilia CCD4 (2013)**

Resumen  
M. VEGA , C. LOPEZ , M.J. RODRIGO , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional  
Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB  
Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: dinámica molecular carotenoides, bioinformática anclaje CCDs  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Antiinflammatory Activity of Phenolic Compounds extracted from Uruguayan Propolis and Grape (Vitis Vinifera) Pomace: In Vitro and In Silico Assays (2013)**

Resumen  
E. ALVAREDA , P. MIRANDA , V. ESPINOSA , H. PARDO , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional  
Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB

Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: docking antioxidantes, fenoles COXII  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

**Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies (2013)**

Resumen  
P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional  
Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: Aspergillus nidulans molecular dynamics docking CreA pattern recognition  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Estudio in silico de ligandos de la GNMT: potenciales agentes de diagnóstico PET para el cáncer de próstata (2013)**

Resumen  
F. ZOPPOLO , E. SAVIO , P. OLIVER , M. PAULINO ZUNINI , H. ENGLER

Evento: Nacional  
Descripción: ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: in silico PET cancer GNMT Glycyl N metil transferasa  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: CD-Rom

**Estudio in silico de moléculas marcadoras de astrocitos: potenciales agentes de diagnóstico PET para enfermedad de Alzheimer y otras encefalopatías (2013)**

Resumen  
I. KREIMERMAN , E. SAVIO , P. OLIVER , M. PAULINO ZUNINI , H. ENGLER

Evento: Nacional  
Descripción: ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: alzheimer in silico PET  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: CD-Rom

**SINTESIS, ESTUDIOS DE DOCKING Y EVALUACION DE LA ACTIVIDAD TRIPANOSOMICIDA DE NUEVAS QUINONAS HETEROCICLICAS. (2013)**

Completo  
K. VAZQUEZ , C.O. SALAS , M. PAULINO ZUNINI , R. TAPIA , C. ESPINOZA , J. VARELA , H. CERECETTO , M. GONZÁLES

Evento: Internacional  
Descripción: XIX Simposio Nacional de Química Orgánica (XIX SINAQO)  
Ciudad: La Plata Argentina  
Año del evento: 2013  
Publicación arbitrada  
Editorial: J. Varela, H. Cerecetto, M. González.

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Extracción, análisis e identificación de carotenoides  
Medio de divulgación: Papel

**PREDICCIÓN DE TIEMPOS DE RETENCIÓN CROMATOGRÁFICOS DE FENOLES EN PROPÓLEOS UTILIZANDO MOE-QSAR y MOE-GA (2012)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , E. ALVAREDA , V. ESPINOSA , L. CALDERÓN

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Página inicial: 60

Página final: 60

ISSN/ISBN: 16889819

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias © SUB

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: qsar, fenoles

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina obtenidos por QSAR y Filtrado Virtual con Farmacóforo (2012)**

Resumen

A. BOADO , G. SILVA , J.A. ABIN , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Página inicial: 62

Página final: 62

ISSN/ISBN: 16889819

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: nicotinicos, qsar, farmacóforo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujo de uva. (2012)**

Resumen

M. PEARCE , A. ROASCIO , A. GAMBARO , H. PARDO , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Página inicial: 122

Página final: 122

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: orujos, liposomas, antioxidantes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / procesos extractivos, análisis de antioxidantes, liposomación

Medio de divulgación: Papel

**Estudio farmacofórico de fenoles de uvas y su anclaje a Xantina Oxidasa (2012)**

Resumen

P. MIRANDA , C. ZABALETA , E. BOIDO , H. PARDO , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Página inicial: 43

Página final: 43

ISSN/ISBN: 16889819

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: xantin oxidasa, fenoles, docking

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Medio de divulgación: Papel

**Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados (2011)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , M. PEARCE , A. ROASCIO , M. TAVOLARA , Y. RODRIGUEZ , V. ESPINOSA , S. AGUILERA-MORALES

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI 2011

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acid interactions (2011)**

Resumen

A. ESTÉVES , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI 2011

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: Echinococcus granulosus FABPs

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Estudio in silico de la interacción de citisinoides con la proteína de unión a acetilcolina (2010)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , J.A. ABIN , B.K. CASSELS , S. WONNACOTT , F. DAJAS

Evento: Nacional

Descripción: Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Biotecnología.

Ciudad: Maldonado

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: agonistas nicotínicos docking

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Modelado por homología y estudio comparativo por anclaje y dinámica molecular de la interacción entre ácidos grasos y las proteínas . EgFABP1 y EgFABP2 (2010)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES

Evento: Nacional  
Descripción: Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Bioinformática  
Ciudad: Maldonado  
Año del evento: 2010  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: dinámica molecular FABPs docking  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**FATTY ACID BINDING PROTEINS FROM CESTODES (2010)**

Resumen  
G. ALVITE , A. KUHN , M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES

Evento: Internacional  
Descripción: 51st International Conference on the Biosciences of Lipids  
Ciudad: Bilbao España  
Año del evento: 2010  
Palabras clave: cestodes FABPs  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**In silico studies of sesquiterpene lactones with inhibitory activity of Nuclear Factor kappa B (2010)**

Resumen  
L.A. CASTRO , S. AGUILERA-MORALES , F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: ISCB Latin-America  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2010  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: latonas sesquiterpénicas factor nuclear kappa beta  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Estudio de citotoxicidad de naftofuranquinonas sobre el linfoma T murino EL-4 (2010)**

Resumen  
M. DUBIN , M.E. DI ROSSO , M.L. BARREIRO ARCOS , I. ELINGOLD , M. PAULINO ZUNINI , E. DA SILVA , G. CREMASCHI

Evento: Regional  
Descripción: Oncology Meeting  
Ciudad: Buenos Aires  
Año del evento: 2010  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: naftofuranquinonas citotoxicidad  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de los procesos cancerosos  
Medio de divulgación: Papel

**Medidas de la capacidad antioxidante en extractos de propóleos uruguayos (2007)**

Resumen

E. ALVAREDA , I. ELINGOLD , M. CASANOVA , C. ROJAS , M. DUBIN , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional

Descripción: I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Palabras clave: antioxidantes propoleos uruguayos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Medio de divulgación: Papel

**Estudios QSAR, Screening Virtual y Docking a Xantin Oxidasa de Polifenoles presentes en Productos Naturales (2007)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , L. CALDERÓN , E. ALVAREDA , C. ROJAS , S. AGUILERA-MORALES

Evento: Internacional

Descripción: I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Palabras clave: xantin oxidasa, fenoles, docking

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Modelización biomolecular de hormonas neuroendocrinas en soluciones acuosas y fisiológicas (2006)**

Resumen

M.C. DONNAMARIA , M. PAULINO ZUNINI , S.N. MONACHESI , Z. CATALDI , F. LAGE

Evento: Nacional

Descripción: XXXV Annual Meeting of the Argentinean Biophysical Society

Ciudad: Santa fé, Rosario, Argentina

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Palabras clave: hormonas neuroendócrinas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Estudios QSAR, PCA y de Screenig Virtual de polifenoles presentes en mieles, propóleos, marcela, té verde y carqueja (2006)**

Resumen

E. ALVAREDA , M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ , R. CARRARO , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional

Descripción: V Reunión de la Sociedad Latinoamericana de Fitoquímica y I Congreso de Fitoterápicos del Mercosur

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Palabras clave: propóleos antioxidantes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Modeling of biopeptides in physiological solutions. molecular dynamics simulations (2006)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , C. DONNAMARÍA , R. CARRARO , S.N. MONACHESI , Z. CATALDI , F. LAGE



Evento: Internacional  
Descripción: Medyfinol. XV Conference on Nonequilibrium Statistical Mechanics and Nonlinear Physics.  
Año del evento: 2006  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: dinámica molecular hormonas neuroendocrinas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Measuring Binding Affinities of Phenothiazines to Trypanothione Reductase And Glutathione Reductase By Theoretical Docking And Molecular Dynamics (2005)**

Completo  
F. IRIBARNE , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins  
Ciudad: Dublin  
Año del evento: 2005  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: Phenothiazines trypanothione reductase glutathione reductase  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Structure-activity relationships of trypanocides (2005)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , E. ALVAREDA , P. A. DENIS , M. DUBIN , C. GASTELLU , S. AGUILERA-MORALES , A.O.M. STOPPANI

Evento: Internacional  
Descripción: Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins  
Ciudad: Dublin  
Año del evento: 2005  
Publicación arbitrada  
Editorial: E.J. Barreiro, M. Dubin, C. Gastellu, S. Aguilera and A. O. M. Stoppani  
Palabras clave: trypanocides QSAR  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Modelling and study of cyclosporin A and related compounds in complexes with T. cruzi and human cyclophilins (2005)**

Resumen  
R. CARRARO , J. BÚA , A. RUIZ , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: MGMS Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins  
Año del evento: 2005  
Publicación arbitrada  
Editorial: . R. Carraro, J. Búa, A. Ruiz  
Palabras clave: cyclosporin cyclophilin Trypanosoma cruzi  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos (2005)**

Resumen  
E. ALVAREDA , M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ , L. SCHODERLE , C. MATONTE , L. CALDERÓN , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Regional

Descripción: Primer Congreso de Apicultura del Mercosur  
Ciudad: Maldonado  
Año del evento: 2005  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: antioxidantes propoleos fenoles  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Anti-Trypanosoma cruzi activity of green tea (Camellia sinensis) catechins. Structure Activity Relationship (2004)**

Resumen  
C. GUIDA , M. PAULINO ZUNINI , C. PAVETO , P.A. DENIS , L. CALDERÓN , S. AGUILERA-MORALES , H.TORRES , M.M. FLAWIÁ

Evento: Internacional  
Descripción: Advances in synthetic, Combinatorial and Medicinal Chemistry  
Ciudad: Moscú  
Año del evento: 2004  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: catequinas Trypanosoma cruzi Camellia sinensis Té verde  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Caracterización de una probable enzima del metabolismo de tioles del Trypanosoma cruzi (2003)**

Resumen  
G.A. GARCÍA , P.A. GARAVAGLIA , M. PAULINO ZUNINI , T. MINNING , N. AINCIART , M. POTENZAA , A. M. RUIZ

Evento: Internacional  
Descripción: . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M. Federacion Latinoamericana de Parasitología (FLAP), XVI Congreso Latinoamericano de Parasitología  
Ciudad: La Paz  
Año del evento: 2003  
Publicación arbitrada  
Editorial: . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M  
Palabras clave: Trypanosoma cruzi tioles  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología del Trypanosoma cruzi  
Medio de divulgación: Papel

**Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de tripanotona y glutatión reductasas (2002)**

Resumen  
F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , H. CERECETTO , M. GONZÁLES , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias  
Ciudad: Maldonado - Piriápolis  
Año del evento: 2002  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: tripanotona reductasa Glutation Reductasa anclaje  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds (2002)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , E. ALVAREDA , E. CABRERA , H.

CERECETTO , R. DI MAIO , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY , C. GASTELLU

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: anti-trypanosome

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Docking studies of nitrofurán compounds in trypanothione and glutathione reductases active sites: A graphical analysis (2002)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , H. CERECETTO , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Estudios de docking de compuestos fenotiazínicos en tripanotona y glutatión reductasa: Un análisis gráfico (2002)**

Resumen

F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , E. ALVAREDA , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional

Descripción: I Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanotona reductasa Glutatión Reductasa fenotiazinas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Estudios de farmacología Molecular de Compuestos Bioactivos en Tripanosomatídeos (2002)**

Resumen

A. GARCIA OTERO , F. IRIBARNE , E. CABRERA , H. CERECETTO , R. DI MAIO , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional

Descripción: X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanosomatídeos bioactivos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevida y muerte celular (2002)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , L. LAFON , S. SEPÚLVEDA-BOZA , S. AGUILERA-MORALES , F. DAJAS

Evento: Internacional  
Descripción: XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2002  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: QSAR flavonoides muerte celular  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

#### **Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas (2002)**

Resumen  
E. ALVAREDA , F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , A.O.M STOPPANI , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Local  
Descripción: !a Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2002  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: QSAR o-naftoquinonas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

#### **Estudio de docking de derivados fenotiazinicos en los sitios activos de tripanotona reductasa y glutatión reductasa (2001)**

Resumen  
F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , S. AGUILERA-MORALES , A.O.M STOPPANI

Evento: Internacional  
Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Ciudad: Toulouse Francia  
Año del evento: 2001  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: tripanotona reductasa Glutatión Reductasa fenotiazinas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

#### **Estudios de docking y dinámica molecular en los sitios de unión de tripanotona reductasa y glutatión reductasa (2000)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY , O. TAPIA

Evento: Internacional  
Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Ciudad: Caxambu. Minas Gerais. Brasil  
Año del evento: 2000  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: dinámica molecular tripanotona reductasa docking Glutatión Reductasa  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

#### **Diseño asistido por computadora de compuestos tripanosomatideos potencialmente activos (2000)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. HANSZ , J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR , I. CARACELLI , G. SEOANE , H. CERECETTO , C. OLEA-AZAR , A.O.M STTOPPANI , M. BERRIMAN , A.H. FAIRLAMB , O. TAPIA

Evento: Internacional  
Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Caxambú-Minas Gerais - Brasil

Año del evento: 2000

Publicación arbitrada

Palabras clave: anti-tripanosoma

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Proton relays at the N-site and C-site of glutathione reductase. Molecular electronic antecedents for a sequentially-ordered mechanism (1998)**

Resumen

F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics

Ciudad: Granada - Spain

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Palabras clave: proton relay trypanothione reductase N-site glutathione reductase C-site

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Theoretical and experimental studies of interaction between CreA and DNA target in Aspergillus nidulans (1998)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , P. ESPERÓN , M. VEGA , M. VITAL , C. SCAZZOCCHIO

Evento: Internacional

Descripción: VII Congreso Iberoamericano de Biología Celular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Palabras clave: Aspergillus nidulans CreA DNA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

**Crystal structure of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized and docked structures (1997)**

Resumen

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR , M. PAULINO ZUNINI , I. CARACELLI , M. HANSZ , H.

CERECETTO , G. SEOANE , R. DI MAIO , O. TAPIA

Evento: Nacional

Descripción: 20a Reuniao Anual. SBQ

Ciudad: Pocos das Caldas - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase docking crystal structure

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Structural Aspects of Specificity in Trypanothione and Glutathione Reductase Binding Sites and the design of new compounds with potential and trypanosomal activity (1997)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. VEGA , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy

Ciudad: Leuven - Belgium

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase Trypanosoma cruzi

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Crystal structures of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized geometries and docked structures (1997)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , I. CARACELLI , M. HANSZ , F. FROLOW , H. CERECETTO , G. SEOANE , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy

Ciudad: Leuven - Belgium

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: docking crystal structure trypanothione analogues

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

**Activity Physicochemical Properties relationships of Nitrofurans Analogues (1997)**

Resumen

R. DI MAIO , M. PAULINO ZUNINI , G. SEOANE , H. CERECETTO , C. OLEA-AZAR , M. HANSZ , O. TAPIA

Evento: Nacional

Descripción: 20a Reuniao Anual. SBQ

Ciudad: Pocos das Caldas - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR nifurtimox

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Síntesis de Potenciales Inhibidores de Trypanothione Reductasa. Semicarbazonas de Furfural y de Tiofencarbaldehído. (1997)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , R. DI MAIO , G. SEOANE , H. CERECETTO , M. RISSO , A. DENICOLA , C. QUIJANO , G. PELUFFO , M.A. BASSOMBRI

Evento: Nacional

Descripción: XI Simposio de Investigadores Argentinos de Química Orgánica

Ciudad: Cordoba - Argentina

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanotiona reductasa semicarbazonas tiofenilcarbaldehído

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Possible role of proton relays in the electronic mechanism of glutathione reductase (1997)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE

Evento: Nacional

Descripción: IX Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: glutathione reductase proton relay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Complexes of T. cruzi: Trypanothione Reductase and 5-nitrofurán derivatives, a theoretical study (1997)**

Resumen

I. CARACELLI, M. PAULINO ZUNINI, M. HANSZ, F. IRIBARNE, H. CERECETTO, R. DI MAIO, G. SEOANE, J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR, O. TAPIA

Evento: Nacional

Descripción: XIV Reuniao da Sociedade Brasileira de Cristalografía

Ciudad: Sao Carlos - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase Trypanosoma cruzi nitrofuranos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Activity-physicochemical properties relationships of nifurtimox analogues (1997)**

Resumen

H. CERECETTO, R. DI MAIO, M. GONZALEZ, A. DENICOLA, G. PELUFFO, C. QUIJANO, AM  
ATRIA, C. OLEA-AZAR, M. HANSZ, M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional

Descripción: 1 st Congress of Pharmaceutocal Sciences

Ciudad: Riberáo Preto - SP - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: chagas nifurtimox SAR

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

**Crystal Structure and Targeted designed trypanothione analogues: A comparison (1996)**

Resumen

J. ZUCKERMANN-SPECTOR, M. PAULINO ZUNINI, I. CARACELLI, M. HANSZ, H. CERECETTO,  
R. DI MAIO, G. SEOANE, O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: WATOC

Ciudad: Jerusalem Israel

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase crystal

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

**Crystal structure of 7-trifluoromethyl-isatin (1996)**

Resumen

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR, G. FINAI, M. PAULINO ZUNINI, I. CARACELLI, M.T.C.  
BARCELLOS, A. DA CUNHA PINTO

Evento: Internacional

Descripción: 19a Reuniao Anual da SBQ

Ciudad: Sao Paulo

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Palabras clave: 7-trifluormrthyl isatin crystal structure

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Obtención de nuevas drogas con posible actividad antichagásica (1995)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , G. SEOANE , H. CERECETTO , M. GONZÁLES , R. DI MAIO , G. IBARRURI

Evento: Nacional

Descripción: VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: antichagasicas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Molecular dynamics study of mutant G418W of glutathione reductase (1995)**

Resumen

N. HIKICHI , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Pucon - Chile

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular dynamics GR G418W

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

**Estudios Dinámicos del mutante G446G de la enzima glutatation reductasa (1995)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI

Evento: Nacional

Descripción: VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: dinámica molecular Glutation Reductasa

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites (1995)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. VEGA , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Pucon - Chile

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Estructura-actividad en naftoquinonas (1995)**



Resumen

M. HANSZ , M. PAULINO ZUNINI , M.P. MOLINA PORTELA , S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL , A.O.M STOPPANI

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Pucon - Chile

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR o-naftoquinonas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Perturbation-relaxation molecular dynamics simulations of zinc-finger protein ZIF268 (1995)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , G. ROXSTROM , I. VELAZQUEZ , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Pucon - Chile

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular dynamics Zinc finger ZIF268

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Relacion Estructura-Actividad en naftoquinonas lipofilicas (1994)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , G. TABARES , M.P. MOLINA PORTELA , S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL , A.O.M STOPPANI

Evento: Nacional

Descripción: XX Congreso Argentino de Química

Ciudad: Cordoba - Argentina

Año del evento: 1994

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR o-naftoquinonas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **A developmental gene of Echinococcus granulosus codes for a 1.5. kilodalton polypeptide related to fatty acid binding protein (1994)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES , B. DELLAGIOVANNA , G. TABARES , R. EHRLICH

Evento: Internacional

Descripción: Santiago Southern Summer Syposium

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 1994

Publicación arbitrada

Palabras clave: Echinococcus granulosus FABPs

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Interacción de 2,4,6-trinitrobencensulfonato con glutathion reductaa (1993)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , D. OFSIEVICH , O. TAPIA

Evento: Internacional  
Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 1993  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: glutathione reductase 2,4,6.trinitrobenzensulfonato  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

#### **Comparación de los sitios de unión en glutatión reductasa y tripanotona reductasa (1993)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , F. STAMATO , O. TAPIA

Evento: Internacional  
Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 1993  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: tripanotona reductasa Glutathion Reductasa  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

#### **Estudio de la especificidad de sustratos disulfuro de tripanotona reductasa (1993)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. VEGA , G. BOUGARIN , O. TAPIA

Evento: Internacional  
Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 1993  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: tripanotona reductasa  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química  
Medio de divulgación: Papel

#### **Study of substrate specificity in trypanothione reductase, (1993)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. VEGA , G. BOUGARIN , O. TAPIA

Evento: Internacional  
Descripción: VII Simposio Brasileiro de Química Teórica  
Ciudad: Caxambú Brasil  
Año del evento: 1993  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: disulfide specificity  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

#### **Unión de nitrofuranos con sustituyentes tipo espermidina y tripanotona reductasa (1993)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , M. KANN , O. TAPIA

Evento: Internacional  
Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 1993  
Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanotiona reductasaespermidina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Relaciones estructura-actividad y binding a glutatión reductasa de naftoquinonas (1993)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , F. STAMATO , A.O.M STOPPANI

Evento: Internacional

Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR Glutation Reductasa o-naftoquinonas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **A molecular dynamics study of the structure of glutathione reductase (1993)**

Resumen

N. HIKICHI , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Evento: Nacional

Descripción: VI Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular dynamics glutathione reductase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Study of disulfide specificity in Trypanothione reductase (1993)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , M. VEGA , F. IRIBARNE , O. TAPIA

Evento: Nacional

Descripción: VII Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase disulfide

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Computer simulations and molecular graphics modelling. The 3D structures of transport proteins (1993)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: The International Workshop on biology of Parasitism

Ciudad: Maldonado - Solis

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular graphics modelling 3D structures transport proteins parasitism

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Molecular Modelling and Dynamics of EgDF1 (1993)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES , B. DELLAGIOVANNA , G. TABARES , R. EHRlich , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: The International Workshop on biology of Parasitism

Ciudad: Maldonado - Solis

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular dynamics EgDf1 fatty acid carrier proteins

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Dinamica molecular de glutation reductasa en el diseño de drogas antichagasicas selectivas (1993)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , O. TAPIA

Evento: Internacional

Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: dinámica molecular Glutation Reductasa antichagasicas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Synthesis of possible inhibitors of the trypanothione reductase trypanocidal activity (1992)**

Resumen

G. SEOANE , H. CERECETTO , M. GONZÁLES , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional

Descripción: I Jornada de pesquisa da AUGM

Ciudad: Santa Maria

Año del evento: 1992

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase inhibitors

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Propiedades dependientes de las estructuras electrónicas de los nitrofuranos y su correlación con las actividades biológicas (1991)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Evento: Local

Descripción: II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR nitrofuranos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

#### **Modelado molecular de flavoproteinas relacionadas con el metabolismo del Trypanosoma y huéspedes mamíferos: Glutation Reductasa, Lipoamida Deshidrogenasa y Tripanotiona Reductasa (1991)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Evento: Local

Descripción: II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase lipoamide deshydrogenase

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Accion de nitrofuranos de síntesis sobre modelo murino de infección por T. cruzi (1991)**

Resumen

E. CIVILA, R. SALVATELLA, R. MANCEBO, R. ROSA, Y. BADMAJIAN, G. MENDARO, M. FERNANDEZ, H. CERECETTO, S. ONETTO, M. PAULINO ZUNINI, A.O.M STTOPPANI

Evento: Local

Descripción: II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: Trypanosoma cruzi nitrofuranos Modelo Murino

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Comparacao dos sitios activos e relacao entre os idstintos mecanismos de acao das enzimas tripanotiona reductase, gluationa reductase e lipamida desidrogenase (1991)**

Resumen

E. HORJALES, F. STAMATO, M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional

Descripción: 14a Reunioao Anual da Sociedade Brasileira de Química

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase lipoamide deshydrogenase

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Modelado Molecular de Nitrofuranos empleando métodos mecánico moleculares y químico-cuánticos. Comparación con datos cristalográficos (1991)**

Resumen

M. HANSZ, N. HIKICHI, M. PAULINO ZUNINI, A.O.M STOPPANI

Evento: Nacional

Descripción: VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: nitrofuranos Mecanica Molecular Mecanica Cuántica

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Gráficos moleculares: Aplicación al Estudio Comparativo de Flavoproteínas (1991)**

Resumen

N. HIKICHI, M. HANSZ, M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional

Descripción: VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: Graficos Moleculares Flavoproteinas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Electronic properties and free radical production by nitrofurans compounds (1991)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , A.O.M STOPPANI

Evento: Internacional

Descripción: International Symposium of Active Oxygen Species and Human Health

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: free radicals nitrofurans electronic properties

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Trypanothione Reductase - NADPH complex: Model building and docking studies of nitrofurans inhibitors (1991)**

Resumen

E. HORJALES , F. STAMATO , B. OLIVA , M. PAULINO ZUNINI , O. NILSSON , M.I. AMBROSSIO , O. TAPIA

Evento: Nacional

Descripción: VI Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase docking nitrofurans

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**A Computer Modelling Study of the Interactions between NADPH and the Flavoenzymes Glutathione-Reductase and Trypanothione Reductase (1991)**

Resumen

E. HORJALES , B. OLIVA , F. STAMATO , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Evento: Nacional

Descripción: VI Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase NADPH

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Relación estructura actividad de alfa-lapachona y o-naftoquinonas relacionadas (1991)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , G. TABARES , M.N. FADEL , L. CADENAZZI , A.O.M STTOPPANI

Evento: Regional

Descripción: Congreso Latinoamericano de Parasitología. I Congreso Uruguayo de Parasitología

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR alfa-lapachona o-naftoquinonas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Accion de Nitrouranos de Síntesis sobre Modelo Murino de Infección por Trypanosoma cruzi (1990)**

Resumen

E. CIVILA , R. SALVATELLA , R. MANCEBO , R. SOSA , Y. BADMAJIAN , G. MENDARO , M. FERNANDEZ , H. CERECETTO , S. ONETTO , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M STTOPPANI

Evento: Regional

Descripción: Congreso Argentino de Protozoología y Reunión sobre Enfermedad de Chagas

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1990

Publicación arbitrada

Palabras clave: Trypanosoma cruzi nitrofuranos Modelo Murino

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Comparison of Gluathione and Trypanothione Reductase-Ligand interactions: X-Ray Crystallography and Molecular Mechanics on Struture-Activity Analysis. (1990)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ

Evento: Internacional

Descripción: International Symposium on Crystallography and Molecular Biology

Ciudad: Sao Paulo

Año del evento: 1990

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Docking Studies on inhibition of Glutathione Reductase by Nitrofurans: its Relation with the ACTive Site of Trypanothione Reductase (1990)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , E. HORJALES

Evento: Internacional

Descripción: International Symposium on Crystallography and Molecular Biology

Ciudad: Sao Paulo

Año del evento: 1990

Publicación arbitrada

Palabras clave: docking glutathione reductase nitrofurans

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Binding Site of Nitrofurans Derivatives into the Active Site of Gluathione and Trypanothione Reductase Modelled using Docking Methods and Molecular Mechanics (1990)**

Resumen

E. HORJALES , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional

Descripción: International Symposium on Crystallography and Molecular Biology

Año del evento: 1990

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase Binding Site nitrofurans

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Generación de Radicales Aniones: Correlaciones Estructura-Actividad para Nitrofuranos (1990)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , A.O.M STTOPPANI

Evento: Regional

Descripción: XIX Congreso Latinoamericano de Química

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1990

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR nitrofuranos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

**Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutación (GSH) (1990)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI

Evento: Internacional

Descripción: XIX Congreso Latinoamericano de Química

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1990

Publicación arbitrada

Palabras clave: Glutation campos de fuerza

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

**Estudio de la Relacion de Estructura-ACtividad para derivados del 5-nitrofurano usando técnicas cromatográficas y computacionales. II congreso Latinoamericano de Cromatografía. Buenos Aires. Octubre 1988. (1990)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , B. MESTER , G SERRA , RM CLARAMUNT , AOM STOPPANI

Evento: Internacional

Año del evento: 1990

Palabras clave: HPLC 5-nitrofurano

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutación (GSH) (1990)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI

Evento: Internacional

Descripción: XIX Congreso Latinoamericano de Química

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1990

Publicación arbitrada

Palabras clave: Glutation campos de fuerza

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

**Inhibición por nitrofuranos de la lipoperoxidación microsomal hepática y reacciones cataliadas por el citocromo P-450 (1990)**

Resumen

M. DUBIN , S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M STTOPPANI



Evento: Internacional  
Descripción: Congreso Latinoamericano de Farmacología  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 1990  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: nitrofuranos lipoperoxidación microsomal hepática  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

**Potencialidad tóxica del Nifurtimox y análogos, su relación con el potencial formal del par R-NO<sub>2</sub>- R-NO<sub>2</sub> y densidad electrónica en el grupo nitro (1990)**

Resumen  
H. CERECETTO , M. GONZÁLES , M. HANSZ , N. HIKICHI , S. ONETTO , F. ZINOLA , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: Congreso Argentino de Protozoología y Reunión sobre Enfermedad de Chagas  
Ciudad: Buenos Aires  
Año del evento: 1990  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: nifurtimox potencial formal  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Inhibición de Glutación Reductasa: Correlación Estructura-Actividad para 5-Nitrofuranos (1990)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ

Evento: Regional  
Descripción: XIX Congreso Latinoamericano de Química  
Ciudad: Buenos Aires  
Año del evento: 1990  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: QSAR nitrofuranos Glutación Reductasa  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Modelado teórico de la estructura del Glutación oxidado generado por Mecánica Molecular (1989)**

Resumen  
M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , F. STAMATO

Evento: Internacional  
Descripción: V Simposio Brasileiro de Química Teórica  
Ciudad: Caxambú - Brasil  
Año del evento: 1989  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: Glutación Mecánica Molecular  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica  
Medio de divulgación: Papel

**Estudio de la Relación Estructura Actividad para derivados del 5-nitrofurano utilizando técnicas cromatográficas y computacionales. Parte II. (1989)**

Resumen  
N. HIKICHI , H. CERECETTO , S. ONETTO , B. MESTER , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional  
Descripción: IV Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas  
Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Palabras clave: in silico chaga's disease nitrofuranos HPLC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

**Comparación de datos Cristalográficos para la Estructura del Glutatión con Cálculos Mecánico Moleculares (1989)**

Completo

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , O.N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: La Plata Argentina

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Extraccion, analisis e identificacion de carotenoides

Medio de divulgación: Papel

**Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para éteres halogenados anestésicos o convulsivantes (1987)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , P RAIMONDA , S LONATI

Evento: Internacional

Descripción: 4º Congreso Argentino de Farmacia y Bioquímica Industrial

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1987

Palabras clave: anestésicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

**Theoretical studies of the molecular complexes between hidroxamics and boric acids. (1987)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Evento: Internacional

Descripción: IV Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú. Minas Gerais. Brasil

Año del evento: 1987

Publicación arbitrada

Palabras clave: hydroxamic acids

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

**Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para hidrocarburos halogenados con actividad anestésica (1986)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , J RAMA , A IGLESIAS , ON VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1986

Publicación arbitrada

Palabras clave: anestésicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

### **Estructura electronica de acidos hidroxamicos y algunos derivados (1983)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , A IGLESIAS , RM SOSA

Evento: Internacional

Descripción: Tercer Congreso Argentino de Fisico Quimica

Ciudad: La Plata Argentina

Año del evento: 1983

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

### **Estudios sobre la potencia anestésica de haloetanos I. Investigación teórica de relaciones estructurales (1983)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , A IGLESIAS , ON VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: Tercer Congreso Argentino de FisicoQuimica

Ciudad: La Plata, Argentina

Año del evento: 1983

Publicación arbitrada

Palabras clave: haloetanos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

### **Estudio Mecanico Cuantico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones (1979)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , RM SOSA

Evento: Internacional

Descripción: Jornadas Química. Cicuentenario de la Facultad de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1979

Palabras clave: ácidos hidroxámicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

## **TEXTOS EN PERIÓDICOS O REVISTAS**

### **PROVITIS: UN CONSORCIO ENTRE LA CIENCIA Y LA PRODUCCIÓN (2015)**

VOCES TECNOLÓGICAS

Revista

M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: propóleos orujos de uvas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de Fitonutrientes

Fecha de publicación: 03/03/2015

Lugar de publicación: MONTEVIDEO

### **Científicos Uruguayos contra el Mal de Chagas. Reportaje a cargo de Nelson Días. (2005)**

Caras y Caretas

Revista

M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: chagas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Fecha de publicación: 20/07/2005

Lugar de publicación: Montevideo

#### **Propiedades fitonutrientes y fitoterapéuticas de hierbas medicinales y productos naturales (2004)**

Caras y Caretas

Revista

M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: fenoles fitonutrientes

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Fecha de publicación: 01/10/2004

Lugar de publicación: Montevideo

#### **Mal de Chagas, Mal de Muchos. Nuevos Fármacos para Combatirlo, (1982)**

Cuadernos de Marcha. Tercera Epoca, Año VIII v: 76, 10, 10

Revista

M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: Mal de Chagas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Fecha de publicación: 30/10/1982

Lugar de publicación: Montevideo

## **Evaluaciones**

### **EVALUACIÓN DE PROYECTOS**

#### **EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS**

##### **CSIC ( 2014 / 2014 )**

Uruguay

CSIC

Cantidad: Menos de 5

##### **Agencia Nacional de Investigación e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable ( 2012 / 2012 )**

Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable

Cantidad: Menos de 5

##### **FOCANLIS ( 2009 / 2009 )**

Argentina

FOCANLIS

Cantidad: Menos de 5

##### **IFS ( 2005 / 2005 )**

Suecia

IFS

Cantidad: Menos de 5

### **EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES**

#### **COMITÉ EDITORIAL**

#### Current Topics in Medicinal Chemistry ( 2013 / 2013 )

Cantidad: Menos de 5

#### Journal of Biomedicine and Biotechnology ( 2011 / 2011 )

Cantidad: Menos de 5

#### Journal of Chilean Chemistry Society ( 2008 / 2014 )

Cantidad: De 5 a 20

#### Journal of Molecular Modeling ( 2005 / 2011 )

Cantidad: De 5 a 20

#### Journal of Molecular Structure ( 2003 / 2003 )

Cantidad: Menos de 5

### EVALUACIÓN DE EVENTOS Y CONGRESOS

Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010. ( 2010 )

Uruguay

### JURADO DE TESIS

**Diseño e implementación de nuevas herramientas para la solubilización y cristalogénesis de proteínas ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

**Maestría en Bioinformática ( 2012 / 2015 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Rectorado - UDeLaR , Uruguay

## Formación de RRHH

### TUTORÍAS CONCLUIDAS

#### POSGRADO

**Dinámica Molecular en GPU aplicada a complejos membrana-proteína-ligando (2014)**

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

Programa: Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA)

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Yamandú Gonzáles

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Dinámica Molecular Graphic Processor Unit

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Modelado y estudio de complejos de Ciclosporina A y compuestos relacionados con una ciclofilina de Trypanosoma cruzi (2013)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Nombre del orientado: Roberto Carraro  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: bioinformática estructural  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

**Identificación de los blancos de acción molecular de flavonoides mediante tamizaje virtual en librerías de estructuras tridimensionales de proteínas (2013)**

Tesis de maestría  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Maestría en Bioinformática  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Diego Carvalho  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: flavonoides blancos de acción tamizaje virtual  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

**Relación Estructura-Actividad de Polifenoles: Desarrollo y Aplicación de Técnicas de Farmacología Molecular y Estudios de Unión a Blancos Involucrados en los Mecanismos de Acción (2011)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Doctorado en Química  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Elena Alvareda Migliaro  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: fenoles oxidoreductasas quinonas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Diseño Racional y caracterización farmacológica de nuevos agonistas nicotínicos derivados de la cistina (2010)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Doctorado en Química  
Nombre del orientado: Juan Andrés Abin Carriquiry  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: agonistas nicotínicos cistina  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de agonistas nicotínicos del nAChR

**Interacciones moleculares de ligandos a las flavoenzimas glutatión reductasa, tripanotona reductasa y lipoamida deshidrogenasa (2005)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Nombre del orientado: Federico Iribarne  
Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

#### **Estudio de las interacciones del represor CreA con el ADN en *Aspergillus nidulans* (2000)**

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Nombre del orientado: Patricia Esperón

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: *Aspergillus nidulans*

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Simulaciones de Dinámica Molecular, Modelado Biomolecular

#### **Modelado molecular y estudios de mecanismos de acción de proteínas asociadas a enfermedades parasitarias. Defensa de Tesis (1999)**

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Nombre del orientado: Mauricio Vega

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

#### **Bases Moleculares de la reactividad de flavoenzimas hacia drogas y ligando (1998)**

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Nombre del orientado: Federico Iribarne

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

### **GRADO**

#### **Carotenoides en hojas de citrus: caracterización in vitro (2013)**

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería, Uruguay

Programa: Licenciatura en Biotecnología

Nombre del orientado: Valentina Velazco

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: carotenoides, bioinformática

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

#### **Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva (2012)**

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Programa: Ingeniería de Alimentos

Nombre del orientado: Marcela Pearce

Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, fenoles  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Desarrollo de extractos antioxidantes a partir de desechos industriales

#### **Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva (2012)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Ingeniería de Alimentos  
Nombre del orientado: Antonella Roascio  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Liposomas de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos industriales

#### **ANÁLISIS IN VITRO E IN SILICO DE LA ACTIVIDAD INHIBITORIA SOBRE XANTINA OXIDASA, Y ANÁLISIS DE LA CAPACIDAD CAPTADORA DE RADICALES LIBRES DE EXTRACTOS ETANÓLICOS DE PROPÓLEOS PROVENIENTES DE URUGUAY (2011)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / , Chile  
Nombre del orientado: Yisel Rodríguez  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Chile, Español  
Palabras Clave: antioxidantes, fenoles  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Esta tutoría se realizó durante mi estadía sabática en la UCN Chile y defendida por la estudiante luego de mi regreso, en el 2011.

#### **Estudio In Silico de los efectos de lactonas sesquiterpénicas en el Factor Nuclear kappa B (NF- $\kappa$ B) (2009)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / , Chile  
Nombre del orientado: Luis Alejandro Castro  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Chile, Español  
Palabras Clave: lactonas sesquiterpénicas antitumorales  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas anticancerígenas

#### **Perfil polifenólico de extractos de propóleos uruguayos por HPLC y estudios de anclaje molecular (docking) con xantina oxidasa (2008)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Bachiller en Química  
Nombre del orientado: Cristhian Rojas  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: flavonoides, antioxidantes, docking  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofarmacia

#### **Estructura De Polifenoles Presentes En Marcela Y Propóleos Y Su Relación Con Biomoléculas Involucradas En El Estrés Oxidativo (2006)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,



Uruguay  
Programa: Licenciatura en Química  
Nombre del orientado: Manuel Cedrés  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: flavonoides, antioxidantes, QSAR  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofármacos, Nutraceuticos

**Estructura de Polifenoles presentes en Productos Naturales y su relación con Biomoléculas involucradas en el stress oxidativo (2006)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,  
Uruguay  
Programa: Bachiller en Química  
Nombre del orientado: Loreto Calderón Cárdenas  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: flavonoides, productos naturales, QSAR, docking  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofármacos, Nutraceuticos

**OTRAS**

**Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas (2013)**

Iniciación a la investigación  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,  
Uruguay  
Nombre del orientado: Pablo Miranda Fierro  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: orujos de uvas, antioxidantes, nanotecnología  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Desarrollo de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos  
industriales  
La orientación del estudiante se está haciendo con la co-tutoría de la Dra Helena Pardo del centro  
NANOMAT del Polo Tecnológico de la Facultad de Química

**TUTORÍAS EN MARCHA**

**POSGRADO**

**Caracterización genómica y proteómica de dioxigenasas responsables del clivaje de carotenoides de especies de citrus (2016)**

Tesis de maestría  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,  
Uruguay  
Programa: Maestría en Bioinformática  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Jorge Cantero  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: citrus oxidasas de carotenoides  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Postgrados en Bioinformática

**Estudio de fenoles con actividad antioxidante y antiinflamatoria y su vinculación con el factor de transcripción NF-kB (2015)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,  
Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Emiliana Fariña  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: propóleos orujos de uvas NF-kB  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Desarrollo de Fitonutrientes

#### **Anclaje Reverso aplicado al descubrimiento de nuevos blancos para el desarrollo de antichagásicos (2014)**

Tesis de maestría  
Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Programa de  
Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay  
Programa: Maestría en Bioinformática  
Nombre del orientado: Brenda Vera  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: Anclaje reverso o-quinona Chagas disease  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### **Screening Virtual, Farmacóforo, QSAR, docking y dinámica molecular de análogos de agonistas nicotínicos en modelos de receptores nicotínicos de acetilcolina (2011)**

Tesis de maestría  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR ,  
Uruguay  
Programa: Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA)  
Nombre del orientado: Gustavo Silva Bueno  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: in silico, nicotínicos  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Desarrollo de agonistas nicotínicos del nAChR  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

### **GRADO**

#### **Estudios experimentales y diseño biomolecular de inhibidores de xantina oxidasa (2007)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR ,  
Uruguay  
Programa: Licenciatura en Química  
Nombre del orientado: Magdalena Dalmás  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: xantina oxidasa  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

## **Otros datos relevantes**

### **PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS**

#### **Investigador Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores (2012)**

(Nacional)  
Agencia Nacional de Investigación e Innovación

#### **Investigador Nivel II del Sistema Nacional de Investigaciones (2009)**

(Nacional)  
Agencia Nacional de Investigación e Innovación

## PRESENTACIONES EN EVENTOS

### Structural Based Drug Design 2017 (2017)

Simposio

Study of polyphenols with antioxidant and anti-inflammatory activity and their correlation with Nuclear Factor Kappa B Paulino, M.a Fariña, E.a, Daghero, H.b, Bollati-Fogolin, M.b, Cantero, Jc.a, Mascayano, C.d, Vega-Tejido, M.a Olea, C.e, Moncada, M.e

Suiza

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 30

Palabras Clave: antiinflamatorios polifenoles NFK-B

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

### Structural Based Drug Design 2017 (2017)

Simposio

DEVELOPMENT OF NEW ANTICHAGASIC DRUGS: REVERSE VIRTUAL SCREENING AND MOLECULAR DYNAMICS OF ARILOXY-QUINONES Brenda Vera, Fabio Polticelli, Andrea Cavalli and Margot Paulino

Suiza

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 30

Palabras Clave: quinonas chagas Anclaje reverso

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

### ICS Symposium <http://www.icslucerne2017.org/> (2017)

Congreso

Study of the geometrical Isomerization of zeaxanthin by chemical and in silico approaches

Gutiérrez-Rodríguez FJ1, Cantero, J2 Mapelli-Brahm, P1, Benítez-González AM1, Stinco CM1, Paulino, M2, Meléndez-Martínez AJ1

Suiza

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 5

Palabras Clave: carotenoides zeaxanthin análisis conformacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

### CHITEL 2015 Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2015)

Congreso

An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus

Italia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad di Torino - Italia

Palabras Clave: molecular dynamics docking CCDs carotenoids Dioxygenases citrus

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

### Fitoquímicos en Agroalimentación y Salud (2015)

Congreso

Bioinformatics applied to the study of bioactive compounds in foods

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: CYTED - España

Palabras Clave: structural bioinformatics carotenoids omics bioinformatics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

#### **IBERCAROT 2014 (2014)**

Encuentro

Structural Bioinformatics applied to the Carotenoids research

Costa Rica

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: CYTED - Spain

Palabras Clave: structural bioinformatics carotenoids

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### **Department of Sciences, Roma Tre University Seminars (2014)**

Seminario

New targets for old drugs: synthesis, in vitro and in silico strategies applied to the discovering of new targets of potent specific tripanosomicidal o-naphtoquinones

Italia

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Department of Sciences, Roma Tre University

Palabras Clave: reverse virtual screening Chagas disease o-quinones

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### **PRIMER ENCUENTRO RIOPLATENSE DE BIOLOGÍA XIV JORNADAS ANUALES DE LA SOCIEDAD ARGENTINA DE BIOLOGÍA (2012)**

Congreso

Bioinformática estructural aplicada al estudio de compuestos bioactivos contenidos en productos naturales

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 32

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Biología

Palabras Clave: Bioinformática

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

#### **Carotenoides como ingredientes de alimentos funcionales, que se celebrará en la Facultad de Farmacia de la Universidad de Sevilla ente los días 10 y 12 de septiembre de 2012. (2012)**

Congreso

BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL APLICADA AL ESTUDIO DE CAROTENOIDES CONTENIDOS EN PRODUCTOS NATURALES

España

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: CYTED España

Palabras Clave: carotenoides, bioinformatica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

#### **Meeting with graduate students of Roma 3 University (2012)**

Seminario

Drug design methods available in the Structural Bioinformatic Center - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR

Italia

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Roma 3 University

Palabras Clave: drug design, bioinformatics

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

#### **ENAGUI 2011 (2011)**

Congreso

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acids interactions Adriana Esteves<sup>1,\*</sup> and Margot Paulino Zunini<sup>2,\*</sup>

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Facultad de Química - PEDECIBA

Palabras Clave: Echinococcus granulosus transportadores de ácidos grasos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

#### **Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2010)**

Congreso

Bioinformática y Diseño de Drogas. Mesa de Bioinformática. Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

Palabras Clave: bioinformática estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### **Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (2010)**

Simposio

Bioinformatics in Ligand-Based and Structure-Based Drug Design, Theoretical and Practical Course and Workshop. February 22th -March 5th, 2010.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay

Palabras Clave: Biomolecular Systems Drug Design

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

#### **Workshop on Molecular Simulation of Bio and Nano Particles (2009)**

Simposio

In silico characterization of cytosine analogues into nicotinic Acetylcholine Receptors 3D Models. Juan Andrés Abin-Carriquiry, Margot Paulino Zunini, Bruce K. Cassels, Federico Dajas.

Chile

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 32

Nombre de la institución promotora: Centro de Bioinformática y Simulación Molecular de la Universidad de Talca

Palabras Clave: nicotínicos in silico nanopartículas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

#### **Conferencia (2008)**

Encuentro

Presentación de resultados del proyecto CSIC-SP al sector Apícola uruguayo

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Fundación Zonamérica  
Palabras Clave: productos naturales propóleos  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química de Antioxidantes

**Simposio satélite Apiterapia. (2007)**

Congreso  
Estudios de fenoles presentes en propóleos  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Facultad de Veterinaria  
Palabras Clave: propóleos  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Medicina Química de Antioxidantes  
M. Paulino Zunini. Montevideo

**4° AFFASA Symposium. (2006)**

Simposio  
3.1.36 M. Paulino Zunini. Structure Activity Relationships of Polyphenols in Natural Products.  
IIBCE. Montevideo. Uruguay. Conferencista Invitado. 2006  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 20  
Nombre de la institución promotora: INSTITUTO DE INVESTIGACIONES BIOLÓGICAS  
CLEMENTE ESTABLE

**A la puerta de los 100 años del conocimiento de una endemia americana ancestral. Balance y futuro, 1909-2006. Chagas, hacia el Siglo XXI. (2006)**

Congreso  
La enfermedad de Chagas.  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Instituto Mario Fátala Chabén  
Palabras Clave: Enfermedad de Chagas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Desarrollo de drogas  
M. Paulino Zunini. Buenos Aires

**SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE (2005)**

Simposio  
Consensus statement: session 9. Discovery Research and New Therapeutic tools  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: TDR, WHO/PAHO, CDIA  
L Flohe, R. Radi, M. Paulino, SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE. Buenos Aires, 17-19 Abril 2005.

**Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad, de Biotecnología de Productos/Recursos Naturales. (2005)**

Encuentro  
Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Ciencia Tecnología y Sociedad  
M. Paulino Zunini, Montevideo

**Primer Congreso de Apicultura del Mercosur (2005)**

Congreso  
Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos.  
Uruguay  
Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Apícola Uruguaya

Palabras Clave: bioinformática estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Elena Alvareda, Manuel Cedrés Fernández, Lorena Shöderle, Cecilia Matonte, Loreto Calderón, Margot Paulino Zunini, 24-29 junio 2005. Punta del Este, Maldonado, Uruguay.

**3.1.38 Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad (2005)**

Encuentro

3.1.38 M Paulino Zunini. Medicina Química de Antioxidantes: Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela. Conferencista invitado Uruguay; Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad . Montevideo. 2005

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

**3.1.44 Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE. (2004)**

Seminario

3.1.44 M. Paulino Zunini. Estrategias que colaboran en el aumento del valor agregado de los productos naturales. Conferencista Invitada. Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE. Montevideo, Uruguay. 2004.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

**Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace (2004)**

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: NASA USA - Facultad de Química /UdelaR

M. Paulino Zunini, Montevideo

**Reunión de coordinación CYTED (2004)**

Encuentro

3.1.48 Caracterización Estructural de Macromoléculas Biológicas de interés en la formulación de droga antiparasitarias

Uruguay

Tipo de participación: Moderador

Carga horaria: 30

**Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace (2003)**

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace

Estados Unidos

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: NASA USA - Universidad de Alabama / Birmingham

M. Paulino Zunini

**3.1.49 Curso Regional Investigación y desarrollo de fármacos antoprotzoarios. AMSUD-Pasteur. Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR. Montevideo. Uruguay. 2003 (2003)**

Simposio

3.1.49 Medicinal Chemistry based approach and target-based drug research for the design and structure optimization of new compounds against Chagas disease

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: 3.1.49 Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR.

**Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace (2002)**

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace

Costa Rica

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: NASA USA - EARTH Costa Rica

M. Paulino Zunini

**Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2002)**

Congreso

Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias

Palabras Clave: bioinformática estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

E. Alvareda, F. Iribarne, A. García, A.O.M. Stoppani, M. Paulino, 29-30 november 2002,

Montevideo-URUGUAY .

**Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2002)**

Congreso

Estudios de docking y PCA de fenotiazinas en los sitios activos de tripanotiona reductasa y glutatión reductasa,

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias

Palabras Clave: bioinformática estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

F. Iribarne, S. Aguilera, M. Murphy, A. O. M. Stoppani and M. Paulino, november 29-30 2002,

Montevideo-URUGUAY

**Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)**

Congreso

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Facultad de Química

Palabras Clave: bioinformática estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

M. Paulino\*, F. Iribarne, A. García Otero, E. Alvareda, E. Cabrera, H. Cerecetto, R. Di Maio, S.

Aguilera, M. Murphy, C. Gastellú Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002

**XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Montevideo. (2002)**

Congreso

Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevivida y muerte celular

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Facultad de Química

Palabras Clave: bioinformática estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Margot Paulino, Laura Lafon, Silvia Sepúlveda-Boza, Sara Aguilera-Morales y Federico Dajas.

Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.



#### **XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. (2002)**

Congreso  
Estudios de docking de compuestos nitrofuránicos en tripanotona y glutatión reductasas: un análisis grafico.  
Uruguay  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química  
Palabras Clave: bioinformática estructural  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas  
Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Sara Aguilera, Miguel Murphy y Margot Paulino. Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.

#### **X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2002)**

Congreso  
Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de la Tripanotona y Glutatión Reductasa,  
Uruguay  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de biociencias  
Palabras Clave: bioinformática estructural  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas  
Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Mercedes González, Sara Aguilera, Miguel Murphy, Margot Paulino, 10-12 mayo 2002, Maldonado

#### **Seminario (2001)**

Seminario  
Docking and Molecular Dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites  
Canadá  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Department of Chemistry and Biochemistry, Laurentian University  
M. Paulino Zunini

#### **Seminario (1999)**

Seminario  
Modelado Biomolecular de proteínas. Aplicaciones al diseño de inhibidores enzimáticos y de proteínas que unen ADN  
España  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Univ. de Granada.España. Instituto de Biotecnología Lopez Neira  
M. Paulino Zunini

#### **Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo (1998)**

Encuentro  
3.1.68 M. Paulino Zunini. Cuatro modelos de biomoléculas resueltos por Química Computacional: Tripanotona reductasa y Partícula nucleosomal de *T. cruzi*, EgDF1 y Malato deshidrogenasa de *E. granulosus*. Conferencista invitada. Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo, Uruguay. 1998  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 30  
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

#### **Workshop sobre Modelado Molecular. Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas (1997)**

Congreso  
Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas  
Brasil

Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Sociedad Brasileira de Cristalografía  
M. Paulino Zunini

**Conference Summing up 10 years of Bilateral Research Cooperation. (1996)**

Congreso  
Diseño de Antichagásicos  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: SAREC  
M. Paulino Zunini

**3.1.91 Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular, Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases. (1994)**

Simposio  
3.1.91 M. Paulino Zunini. Theoretical and experimental pharmacological approach to Chagas disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian hosts. Conferencista invitada Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular, Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases. Noviembre 1994. Montevideo. Uruguay. 1994  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: SAREC

**Simposio de la Asociación Médica Uruguaya (1993)**

Simposio  
3.1.99 M. Paulino Zunini. Estudio de nuevas drogas contra T. cruzi. Conferencista invitada. Simposio Enfermedad de Chagas en el Uruguay. Asociación Médica del Uruguay. Montevideo Uruguay. 1993  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 20  
Nombre de la institución promotora: Asociación Médica Uruguaya

**JURADO/INTEGRANTE DE COMISIONES EVALUADORAS DE TRABAJOS ACADÉMICOS**

**Cribado molecular y fenotípico de compuestos con potencial efecto farmacológico contra enfermedades causadas por tripanosomátidos (2017)**

Candidato: Diego Benítez  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
GAMBINO D , LABADIE , M. PAULINO ZUNINI  
Pro.In.Bio Programa Para la Investigación en Ciencias Médicas / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Tripanosomiasis, Leishmaniasis  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biomedicina

**Estudio de la capacidad ANTIOXIDANTE EN VINOS TINTOS URUGUAYOS (2015)**

Candidato: Santiago Deicas  
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado  
E. BOIDO , A MARTÍN , M. PAULINO ZUNINI  
Ingeniería de Alimentos / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Agronomía - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: antioxidantes vino  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Alimentos

**Búsqueda de agentes anti Trypanosoma cruzi en plantas del Uruguay (2015)**

Candidato: Javier Varela  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Trypanosoma cruzi Plantas del Uruguay  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química  
Revisión del segundo Informe de Avance del Tesista

**Doctorado en Ciencias Biológicas (2014)**

Candidato: Agustín Correa  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
A BUSCHIAZZO , G GONZÁLEZ , P. AGUIAR , L. COITIÑO , M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Ciencias Biológicas / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: cristalografía  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Cristalografía

**No indica (2013)**

Candidato: Mauricio Argimón  
Tipo Jurado: Trabajo de conclusión de curso de Grado  
M. PAULINO ZUNINI  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**MODELADO MOLECULAR DE PROCESOS RELACIONADOS A LA TRANSCRIPCIÓN DEL VIRUS VIH-1 (2012)**

Candidato: Matias Machado  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Modelización estructural de la interacción entre proteína quinasa dependiente de AMPc y la proteína core del virus de Hepatitis C (2011)**

Candidato: Astrid Bradner  
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado  
M. PAULINO ZUNINI  
Licenciatura en Bioquímica / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: virus Hepatitis C proteína quinasa  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**No indica (2010)**

Candidato: Lucia Otero  
Tipo Jurado: Otras  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**No indica (2007)**

Candidato: Alicia Merlino  
Tipo Jurado: Otras  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /  
Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi (2007)**

Candidato: Mariana Boiani  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi (2006)**

Candidato: Mariana Boiani  
Tipo Jurado: Otras  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Eflujo activo de antibióticos mediaa por el sistema MTRH-MtrC-MtrE en Neisseria gonorrhoeae (2005)**

Candidato: Ana Acevedo  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico (2004)**

Candidato: Pablo Denis  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Estudio químico y biológico de derivados de N- Óxidos de benzo[1,2 - d]imidazol y aza análogos (2003)**

Candidato: Mariana Boiani  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
M. PAULINO ZUNINI  
Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de  
la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Química en solución acuosa de dioxocomplejos de Re (V) (2002)**

Candidato: Jorge Gancheff  
Tipo Jurado: Otras  
M. PAULINO ZUNINI  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay

Idioma: Español

#### **Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico (2000)**

Candidato: Pablo Denis

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

M. PAULINO ZUNINI

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

#### **Influencias de la destilación con vapor en las características fisicoquímicas y sensoriales de extractos acuosos de plantas nativas sudamericanas (1990)**

Candidato: Marcelo Miraballes Reynoso

Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado

M. PAULINO ZUNINI

Ingeniería de Alimentos / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /

Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

#### **Análisis de la reactividad intrínseca de nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de fármacos anticancerígenos (Cisplatín y Mitomicina C) (1990)**

Candidato: Alexandra Castro

Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado

M. PAULINO ZUNINI

Licenciatura en Bioquímica / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /

Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

## **Información adicional**

Liderazgo de líneas de Investigación que abarcan Proyectos de investigación, desarrollo e innovación, finalizados o en **ejecución, la mayoría de los cuales están o han sido financiados por fuentes nacionales e internacionales.**

**Tutor de 14 Tesis de grado y postgrado (4 doctorados, 2 maestrías y 7 grados finalizados), dirigiendo al presente 2 Postgrados, 3 Maestrías, 3 Tesinas de grado y una Beca de iniciación. Mas de 50 artículos en revistas arbitradas mas 4 capítulos de libros, siendo Autor correspondiente y/o primer autor en mas del 50%. Mas de 120 trabajos en eventos nacionales e internacionales y mas de 36 conferencias la mayoría en eventos internacionales.**

Coordinadora de la Maestría en Bioinformática PEDECIBA-UdelaR desde el 28 de junio 2011 e Integrante de la Comisión Coordinadora de la Maestría en Bioinformática, titular, desde octubre 2009

Miembro Suplente por el orden Docente en el Consejo de la Facultad de Química, de la Comisión de Dedicación Total de la Facultad de Química, de la Comisión de Ingresos PEDECIBA Química y de la Comisión de Reevaluación PEDECIBA Química. Coordinadora de cursos de postgrado subárea Fisicoquímica de PEDECIBA Química.

## **Indicadores de producción**

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>189</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	58
Completo	58
<b>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</b>	1
Completo	1
<b>Trabajos en eventos</b>	118
<b>Libros y Capítulos</b>	5

Libro publicado	1
Capítulos de libro publicado	4
<b>Textos en periódicos</b>	4
Revistas	4
<b>Documentos de trabajo</b>	3
Completo	3
<b>EVALUACIONES</b>	<b>12</b>
<b>Evaluación de proyectos</b>	4
<b>Evaluación de eventos</b>	1
<b>Evaluación de publicaciones</b>	5
<b>Jurado de tesis</b>	2
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>23</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	18
Tesis de maestría	4
Tesis de doctorado	5
Tesis/Monografía de grado	8
Iniciación a la investigación	1
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</b>	5
Tesis de maestría	3
Tesis/Monografía de grado	1
Tesis de doctorado	1